

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公開特許公報(A)

(11) 特許出願公開番号

特開2012-158593
(P2012-158593A)

(43) 公開日 平成24年8月23日(2012.8.23)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
C07D 309/04 (2006.01)	C07D 309/04 CSP	4C062
G02F 1/13 (2006.01)	G02F 1/13 500	4H027
C09K 19/34 (2006.01)	C09K 19/34	
C09K 19/30 (2006.01)	C09K 19/30	
C09K 19/32 (2006.01)	C09K 19/32	

審査請求 有 請求項の数 21 O L (全 70 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号	特願2012-43433 (P2012-43433)	(71) 出願人	311002067 JNC株式会社 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
(22) 出願日	平成24年2月29日 (2012.2.29)	(71) 出願人	596032100 JNC石油化学株式会社 東京都千代田区大手町二丁目2番1号
(62) 分割の表示	特願2006-539246 (P2006-539246) の分割	(72) 発明者	益川 解文 千葉県市原市五井海岸5番地の1 JNC 石油化学株式会社市原研究所内
原出願日	平成17年9月29日 (2005.9.29)	(72) 発明者	藤田 敦子 千葉県市原市五井海岸5番地の1 JNC 石油化学株式会社市原研究所内
(31) 優先権主張番号	特願2004-291570 (P2004-291570)	Fターム(参考)	4C062 AA01
(32) 優先日	平成16年10月4日 (2004.10.4)		
(33) 優先権主張国	日本国(JP)		

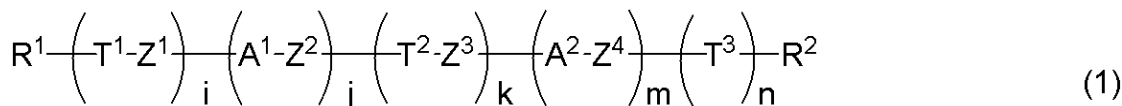
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 テトラヒドロピラン化合物、液晶組成物およびこの液晶組成物を含有する液晶表示素子

(57) 【要約】

【課題】 本発明は、化合物に必要な一般的物性、小さな粘度、適切な光学異方性、適切な誘電率異方性、および他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する液晶性化合物であり、ネマチック相の広い温度範囲、小さな粘度、適切な光学異方性、および低いしきい値電圧を有する液晶組成物である。そして、この組成物を含有した液晶表示素子を提供する。

【解決手段】 式(1)で表される化合物とする。



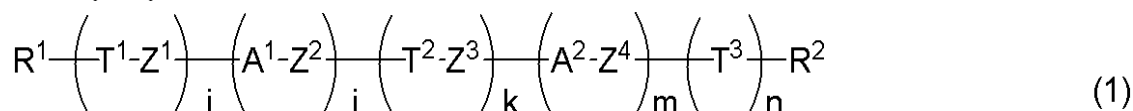
式(1)において、例えば、R¹およびR²は炭素数1~10のアルキルであり；T¹、T²、およびT³はテトラヒドロピラン-2,5-ジイルまたはテトラヒドロピラン-3,6-ジイルであり；A¹およびA²は1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり；Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴は単結合または炭素数1~4のアルキレンであり；nおよびiは0または1であり；j、kおよびmは0、1、または2である。

【選択図】 なし

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

式(1)で表される化合物。



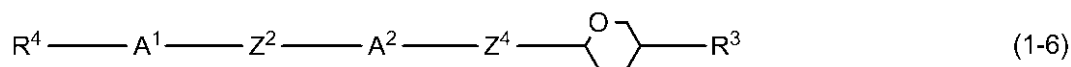
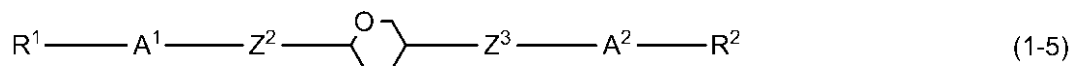
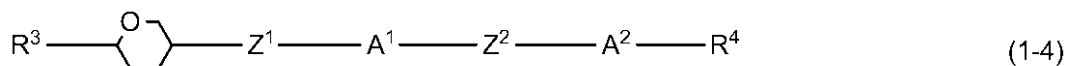
式(1)において、 R^1 および R^2 は独立して炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ 、または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； T^1 、 T^2 、および T^3 は独立してテトラヒドロピラン-2,5-ジイルであり、 A^1 および A^2 は独立して1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、；ただし、 A^1 および A^2 の少なくとも1つは1,4-シクロヘキシレンであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 は独立して単結合または炭素数1~2のアルキレンであり、このアルキレンにおいて $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく； i は0または1であり； j 、 k および m は独立して0または1であり； n は0または1であり； $i+j+k+m+n$ は3であり；そして $i+k+n$ は1であり； i が0のとき、 j は1であり； n が0のとき、 m は1または2であり； i が1のとき、 R^1 は炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ 、または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； n が0のとき Z^4 は単結合であり； $i+k$ が0、 A^1 が1,4-シクロヘキシレン、そして A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^1 および R^2 の少なくとも一つはアルケニルである。

10

20

【請求項 2】

式(1-4)~式(1-6)で表される請求項1に記載の化合物。



30

式(1-4)~式(1-6)において、 R^1 、 R^2 、および R^4 は独立して炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； R^3 は炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； A^1 および A^2 は独立して1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、；ただし、 A^1 および A^2 の少なくとも1つは1,4-シクロヘキシレンであり； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 は独立して単結合または炭素数2のアルキレンであり、このアルキレンにおいて任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく；式(1-6)において A^1 が1,4-シクロヘキシレン、そして A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つはアルケニルである。

40

【請求項 3】

請求項2に記載の式(1-4)~式(1-6)において、 R^1 ~ R^4 が独立して炭素数2から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、炭素数1から9のアルコキシ、炭素数2から9のアルコキシアルキル、炭素数3から9のアルケニルオキシであり； A^1

50

および A^2 が独立して 1, 4 - シクロヘキシレン または 1, 4 - フェニレン であり; Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 が独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ である請求項 2 に記載の化合物。

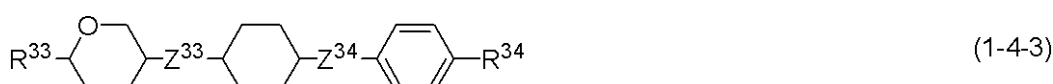
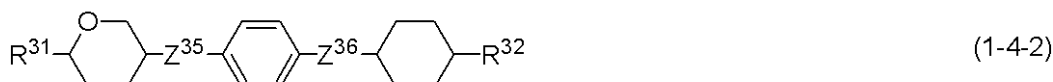
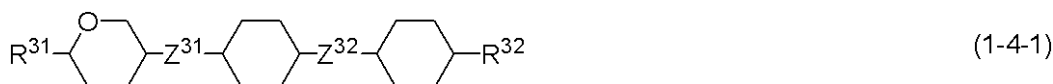
【請求項 4】

請求項 2 に記載の式 (1-4) ~ 式 (1-6) において、 A^1 および A^2 が独立して 1, 4 - シクロヘキシレン である 請求項 2 に記載の化合物。

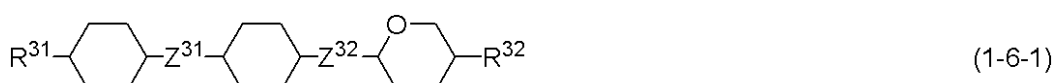
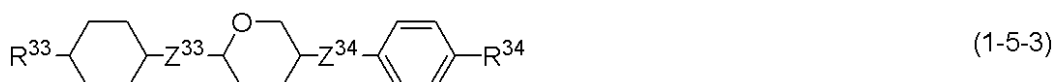
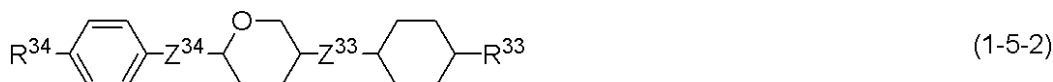
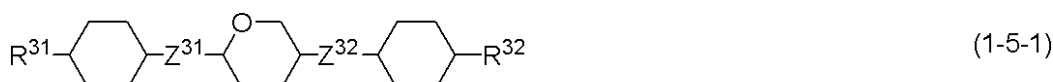
【請求項 5】

式 (1-4-1) ~ 式 (1-4-3)、式 (1-5-1) ~ 式 (1-5-3)、式 (1-6-1) ~ 式 (1-6-3) のいずれか 1 つで表される 請求項 2 ~ 4 のいずれか 1 項に 記載の化合物。

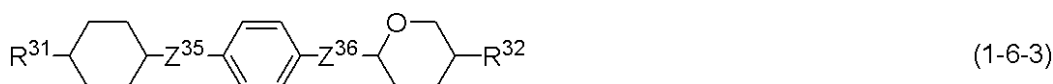
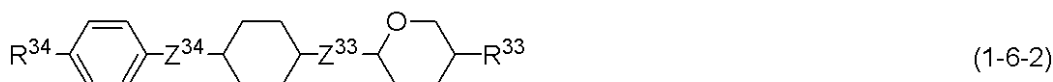
10



20



30



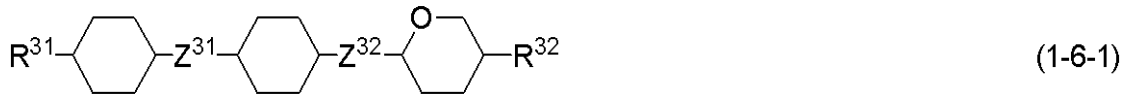
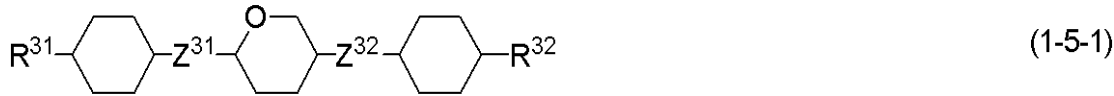
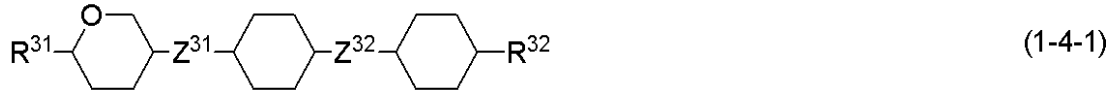
式 (1-4-1) ~ 式 (1-4-3)、式 (1-5-1) ~ 式 (1-5-3)、式 (1-6-1) ~ 式 (1-6-3) において、 R^{31} 、 R^{32} 、および R^{33} は独立して炭素数 2 ~ 10 のアルキル、炭素数 1 ~ 9 のアルコキシまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり; R^{34} は炭素数 2 ~ 10 のアルキル、炭素数 1 ~ 9 のアルコキシ、または 1 - アルケニル以外の炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり; R^{31} および R^{32} のいずれか 1 つはアルキルであり; R^{33} または R^{34} のいずれか 1 つはアルキルであり; Z^{31} 、 Z^{32} または Z^{33} は独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ であり; Z^{34} 、 Z^{35} または Z^{36} は独立して単結合、または $-(CH_2)_2-$ であり; Z^{31} および Z^{32} のいずれか 1 つは単結合であり; Z^{33} および Z^{34} のいずれか 1 つは単結合であり; Z^{35} および Z^{36} のいずれか 1 つは単結合であり; 式 (1-6-3) において、 R^{31} または R^{32} の少なくともひとつはアルケニルである。

40

【請求項 6】

50

式(1-4-1)、(1-5-1)および(1-6-1)のいずれか一つで表される化合物。



式(1-4-1)、式(1-5-1)、式(1-6-1)において、 R^{31} 、および R^{32} は独立して炭素数2~10のアルキル、炭素数1~9のアルコキシまたは炭素数2~10のアルケニルであり； R^{31} および R^{32} の一方はアルキルであり； Z^{31} 、または Z^{32} は独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ であり；そして Z^{31} または Z^{32} のいずれか1つは単結合である。

【請求項7】

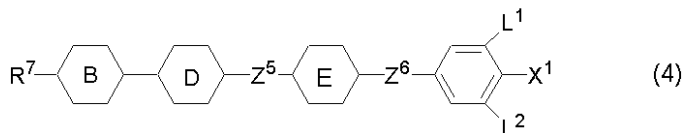
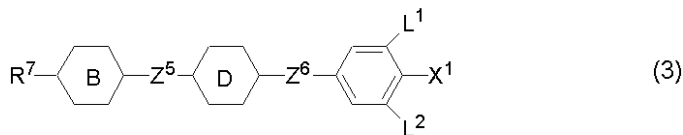
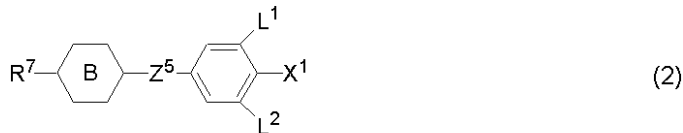
式中の R^{31} および R^{32} の一方がアルキルであり、もう一方がアルケニルである請求項6記載の化合物。 20

【請求項8】

請求項1~7のいずれか1項に記載した少なくとも1つの化合物を含有する液晶組成物。

【請求項9】

下記の式(2)、(3)および(4)で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項8に記載の液晶組成物。

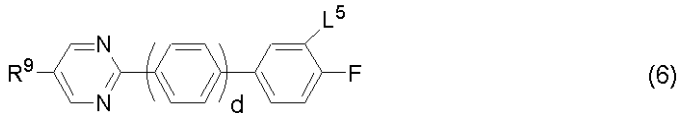
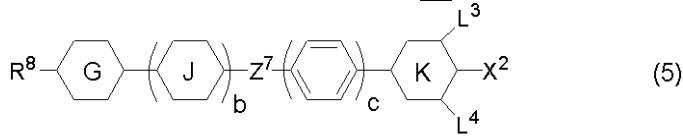


式中、 R^7 は炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^1 はフッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-C_2H_5F$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHF_2CF_3$ であり；環B、Dおよび環Dは独立して1,4-シクロヘキシレン、1,3-ジオキサン-2,5-ジイルまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレンであり、環Eは1,4-シクロヘキシレンまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい1,4-フェニレンであり； Z^5 、および Z^6 は独立して $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、または単結合であり；そし

て L^1 および L^2 は独立して水素またはフッ素である。

【請求項 10】

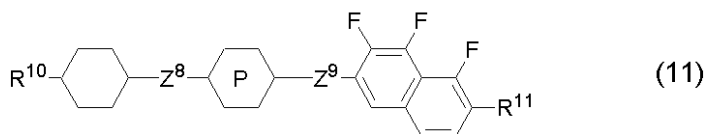
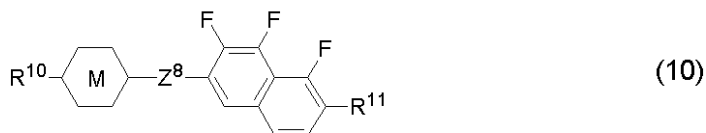
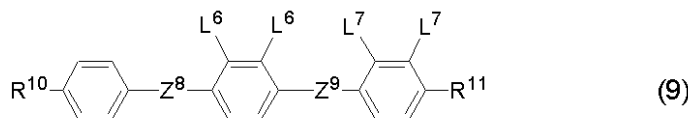
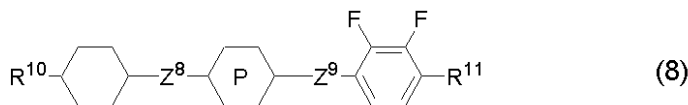
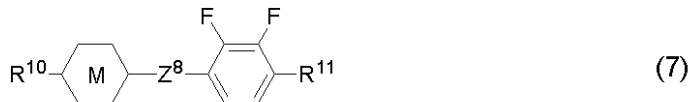
下記の式 (5) および (6) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 8 に記載の液晶組成物。



式中、 R^8 および R^9 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^2 は $-CN$ または $-C(C)CN$ であり；環 G は 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、またはピリミジン - 2, 5 - ジイルであり；環 J は 1, 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2, 5 - ジイルまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり；環 K は 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり； Z^7 は $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または単結合であり； L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素であり；そして b、c および d は独立して 0 または 1 である。

【請求項 11】

下記の式 (7)、(8)、(9)、(10)、および (11) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 8 に記載の液晶組成物。



式中、 R^{10} および R^{11} は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、あるいは R^{10} はフッ素であってもよく；環 M および環 P は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレンまたはデカヒ

10

20

30

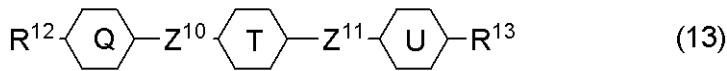
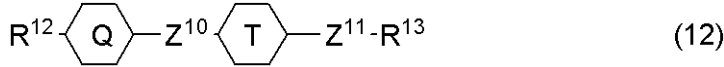
40

50

ドロ - 2, 6 - ナフチレンであり; Z⁸ および Z⁹ は独立して - (CH₂)₂ -, - COO - または単結合であり; そして L⁶ および L⁷ は独立して水素またはフッ素であり、L⁶ と L⁷ の少なくとも一つはフッ素である。

【請求項 12】

下記の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 8 に記載の液晶組成物。



式中、R¹² および R¹³ は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の - CH₂ - は - O - または - CH = CH - で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく; 環 Q、環 T および環 U は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2, 5 - ジイル、または任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり; そして Z¹⁰ および Z¹¹ は独立して - C - C -, - COO -, - (CH₂)₂ -, - CH = CH -, または単結合である。

【請求項 13】

請求項 10 に記載の式 (5) および (6) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 9 に記載の組成物。

【請求項 14】

請求項 12 に記載の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 9 に記載の組成物。

【請求項 15】

請求項 12 に記載の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 10 に記載の組成物。

【請求項 16】

請求項 12 に記載の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する請求項 11 に記載の組成物。

【請求項 17】

少なくとも一つの光学活性化合物をさらに含有する請求項 8 ~ 16 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

【請求項 18】

液晶性化合物の全重量に基づいて、請求項 1 ~ 7 のいずれかに記載の化合物の割合が 5 ~ 90 重量% の範囲である請求項 8 ~ 17 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物。

【請求項 19】

請求項 8 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【請求項 20】

V A または E C B 効果に基づくアクティブマトリクス駆動を有する請求項 19 に記載の液晶表示素子。

【請求項 21】

請求項 8 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は液晶組成物、液晶性化合物および液晶表示素子に関する。さらに詳しくはテト

10

20

30

40

50

ラヒドロピラン化合物、これを含み、そしてネマチック相を有する液晶組成物およびこの組成物を含みする液晶表示素子に関する。

【背景技術】

【0002】

液晶表示素子は液晶物質がもつ光学異方性および誘電率異方性を利用したものである。その表示様式によってTN型（ねじれネマチック型）、DS型（動的散乱型）、ゲスト・ホスト型、DAP型（配向相変型）、STN型（超ねじれネマチック型）およびTF T型（薄膜トランジスタ型）など各種の方式に分けられるが、最近はTN型、STN型およびTF T型の3種類が主流となっている。いずれの表示素子に用いられる液晶材料も、水分、空気、熱、光等に安定であることが必要であるうえ、室温を中心としてできるだけ広い温度範囲で液晶相を示し、低粘性であり、最適な誘電率異方性値（ ）を持ち、最適な屈折率異方性値（ n ）、最適な弾性定数 K および弾性定数比 K_{33} / K_{11} （ K_{33} ：バンド弾性定数、 K_{11} ：スプレイ弾性定数）を持たなければならない。現在のところ単一化合物ではこのような条件をすべて満たす物質はなく、数種から、数十種の液晶性化合物を混合して要求特性に合致させているのが現状である。液晶組成物を調製する際、前述の特性をすべて満たさなければならないため、例えば が小さいため、または、 n が大きいために要求特性を満たせない場合がある。

10

現在、液晶表示素子の高性能化を達成するため、液晶組成物の特性に対する要求が非常に厳しくなっている。このような要求を満足させる目的で、液晶組成物の物性を高度に調整するための液晶化合物が必要とされている。

20

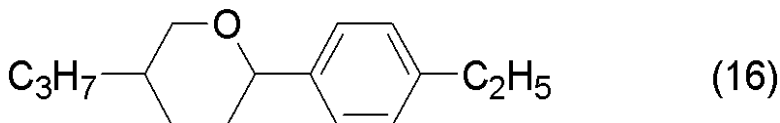
【0003】

また現在、液晶ディスプレイには低温での駆動が可能であることが求められている。通常、低 n の組成物中の化合物にはシクロヘキサン環が多く用いられており、このような組成物は低温において相溶性が良くないため、スメクチック相または結晶が析出しやすい。これらのことから が小さく透明点の高い液晶性化合物、または が小さく相溶性に優れた液晶性化合物の開発が求められている。

【0004】

従来、このような目的に供するための液晶化合物として、例えば下記の化合物（16）が報告されている。（特許文献ドイツ特許第3306960号明細書）しかしながら、この化合物（16）は n が大きく、低温における相溶性が十分とはいえなかった。

30



【0005】

従来技術は下記のとおりである。さらに好ましい液晶性化合物、液晶組成物および液晶表示素子が望まれている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0006】

40

【特許文献1】EP 1 302 523

【特許文献2】DE 1 995 019 4

【特許文献3】DE 1 973 319 9

【特許文献4】DE 1 962 510 0

【特許文献5】GB 2 310 669

【特許文献6】DE 1 961 109 6

【特許文献7】WO 9 623 851

【特許文献8】DE 4 238 377

【特許文献9】DE 4 222 371

【特許文献10】WO 9 213 928

50

【特許文献 1 1】DE 4 1 3 2 0 0 6

【特許文献 1 2】WO 9 1 0 5 0 2 9

【特許文献 1 3】EP 3 7 6 2 9 4

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0007】

本発明の第一の目的は、ネマチック相の広い温度範囲、小さな粘度、適切な光学異方性、および低いしきい値電圧を有する液晶組成物である。第二の目的は、化合物に必要な一般的物性、小さな粘度、適切な光学異方性、適切な誘電率異方性、および他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する液晶性化合物である。第三の目的は、この組成物を含有し、

10

短い応答時間、小さな消費電力、大きなコントラスト、および高い電圧保持率を有する液晶表示素子を提供することにある。

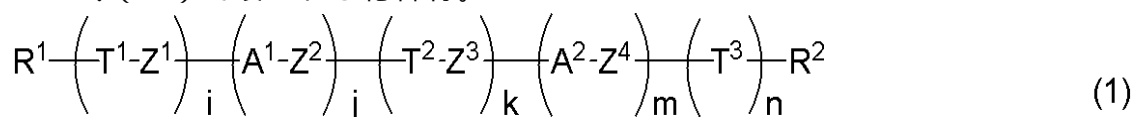
【課題を解決するための手段】

【0008】

本発明は下記の項 1 から項 2 5 のとおりである。化合物 (1) における末端基および結合基に関して好ましい例も述べる。

【0009】

1. 式 (1) で表される化合物。



20

式 (1) において、 R^1 および R^2 は独立して水素または炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ 、または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； T^1 、 T^2 、および T^3 は独立してテトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイルまたはテトラヒドロピラン - 3, 6 - ジイルであり、 A^1 および A^2 は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、またはナフタレン - 2, 6 - ジイルであり、これらの環において一つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、1, 4 - フェニレンにおいて一つの $-CH=$ は $-N=$ で置き換えられてもよく、そしてこれらの環において一つの水素はハロゲン、 $-CF_3$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、または $-OCH_2F$ で置き換えられてもよく； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 は独立して単結合または炭素数 1 ~ 4 のアルキレンであり、このアルキレンにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； i は 0 または 1 であり； j 、 k および m は独立して 0、1、または 2 であり； n は独立して 0 または 1 であり； $i + j + k + m + n$ は 2、3、または 4 であり；そして $i + k + n$ は 1、2、3、または 4 であり； $i + j + k + m + n$ が 2 または 3 のとき、 j 、 k および m は独立して 0 または 1 であり； $i + j + k + m + n$ が 4、 $j + m$ が 3 であり、 n が 1 のとき、 j は 1 であり； i が 0 のとき、 j は 1 または 2 であり； n が 0 のとき、 m は 1 または 2 であり； i が 1 のとき、 R^1 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ 、または $-C=C-$ で置き換えられてもよく； n が 0 のとき Z^4 は単結合であり； $i + k + n$ が 1 のとき、 T^1 、 T^2 および T^3 はテトラヒドロピラン - 2, 5 - ジイルであり； $i + j + k + m + n$ が 2 のとき、 A^1 および A^2 は独立して 1, 4 - シクロヘキシレンまたはデカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイルであり、これらの環において一つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく； $i + j + k + m + n$ が 3 のとき、独立した A^1 および

30

40

50

A^2 の少なくとも1つは1, 4-シクロヘキシレンまたはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり、これらの環において一つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく； $i + j + k + m + n$ が4のとき、独立した A^1 および A^2 の少なくとも2つは1, 4-シクロヘキシレンまたはデカヒドロナフタレン-2, 6-ジイルであり、これらの環において一つの $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく； $i + j + k + m + n$ が3、 $i + k$ が0、 A^1 が1, 4-シクロヘキシレン、そして A^2 が1, 4-フェニレンのとき、 R^1 および R^2 の少なくとも一つはアルケニルであり； $i + j + k + m + n$ が3、 $i + k$ が0、 A^1 が1, 4-シクロヘキシレン、そして A^2 が2-フルオロ-1, 4-フェニレンのとき、 R^2 はアルコキシまたはアルケニルである。

10

【0010】

「アルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は、 $-O-$ 、 $-S-$ 、 $-CO-$ 、または $-SiH_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(CH_2)_2-$ は $-CH=CH-$ 、または $-CC-$ で置き換えられてもよい」の句の意味を一例で示す。 C_4H_9- において任意の $-CH_2-$ を $-O-$ 、または任意の $-(CH_2)_2-$ を $-CH=CH-$ で置き換えた基の例は、 C_3H_7O- 、 $CH_3-O-(CH_2)_2-$ 、 CH_3-O-CH_2-O- 、 $H_2C=CH-(CH_2)_2-$ 、 $CH_3-CH=CH-CH_2-$ 、 $CH_2=CH-CH_2-O-$ などである。このように「任意の」語は、「区別なく選択された少なくとも一つの」を意味する。化合物の安定性を考慮して、酸素と酸素とが隣接した $CH_3-O-O-CH_2-$ よりも、酸素と酸素とが隣接しない CH_3-O-CH_2-O- の方が好ましい。

20

【0011】

好ましい R^1 または R^2 は、炭素数2~10のアルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコシアルキル、アルケニルオキシ、ポリフルオロアルキル、ポリフルオロアルコキシ、およびポリフルオロアルケニルである。これらの基において分岐よりも直鎖の方が好ましい。 R^1 および R^2 が分岐の基であっても光学活性であるときは好ましい。より好ましい R^1 または R^2 は、炭素数2~10のアルキル、アルケニル、アルコキシ、アルコシアルキル、またはアルケニルオキシである。最も好ましい R^1 および R^2 は炭素数2~10のアルキル、アルコキシ、またはアルケニルである。

【0012】

アルケニルにおける $-CH=CH-$ の好ましい立体配置は、二重結合の位置に依存する。1-プロペニル、1-ブテニル、1-ペンテニル、1-ヘキセニル、3-ペンテニル、3-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはトランス配置が好ましい。2-ブテニル、2-ペンテニル、2-ヘキセニルのようなアルケニルにおいてはシス配置が好ましい。

30

【0013】

具体的な R^1 または R^2 は、メチル、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、メトキシメチル、メトキシエチル、メトキシプロピル、エトキシメチル、エトキシエチル、エトキシプロピル、プロポキシメチル、ブトキシメチル、ペントキシメチル、ビニル、1-プロペニル、2-プロペニル、1-ブテニル、2-ブテニル、3-ブテニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、2-プロペニルオキシ、2-ブテニルオキシ、2-ペンテニルオキシ、 $-CH_2F$ 、 $-CHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-(CH_2)_2F$ 、 $-CF_2CH_2F$ 、 $-CF_2CHF_2$ 、 $-CH_2CF_3$ 、 $-CF_2CF_3$ 、 $-(CH_2)_3F$ 、 $-(CF_2)_2CF_3$ 、 $-CF_2CHF_2CF_3$ 、 $-CHF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-OCH_2F$ 、 $-OCF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、 $-OCF_2CH_2F$ 、 $-OCF_2CF_2CF_3$ 、 $-OCF_2CHF_2CF_3$ 、 $-OCHF_2CF_2CF_3$ 、 $-CH=CHF$ 、 $-CH=CF_2$ 、 $-CF=CHF$ 、 $-CH=CHCH_2F$ 、 $-CH=CHCF_3$ 、および $-(CH_2)_2CH=CF_2$ である。

40

【0014】

より好ましい R^1 または R^2 は、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘブ

50

チル、オクチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、メトキシメチル、メトキシエチル、メトキシプロピル、エトキシメチル、エトキシエチル、エトキシプロピル、プロポキシメチル、ブトキシメチル、ペントキシメチル、ビニル、1 - プロペニル、2 - プロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ブテニル、1 - ペンテニル、2 - ペンテニル、3 - ペンテニル、4 - ペンテニル、2 - プロペニルオキシ、2 - ブテニルオキシ、および2 - ペンテニルオキシである。最も好ましいR¹またはR²は、エチル、プロピル、ブチル、ペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、ブトキシ、ペンチルオキシ、ヘキシルオキシ、ヘプチルオキシ、ビニル、1 - プロペニル、2 - プロペニル、1 - ブテニル、2 - ブテニル、3 - ブテニル、1 - ペンテニル、2 - ペンテニル、3 - ペンテニル、および4 - ペンテニルである。

10

【0015】

A¹、およびA²は独立して1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、またはナフタレン - 2, 6 - ジイルであり、これらの環において一つの - CH₂ - は、- O -、- S -、- CO -、または - SiH₂ - で置き換えられてもよく、任意の - (CH₂)₂ - は - CH = CH - で置き換えられてもよく、1, 4 - フェニレンにおいて一つの - CH = は - N = で置き換えられてもよく、そしてこれらの環において一つの水素はハロゲン、- CF₃、- CHF₂、- CH₂F、- OCF₃、- OCHF₂、または - OCH₂Fで置き換えられてもよい。

20

【0016】

好ましいA¹、およびA²は1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン、3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン、デカヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、1, 2, 3, 4 - テトラヒドロナフタレン - 2, 6 - ジイル、またはナフタレン - 2, 6 - ジイルである。より好ましいA¹、およびA²は1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、2 - フルオロ - 1, 4 - フェニレン、および3 - フルオロ - 1, 4 - フェニレンである。最も好ましいA¹、およびA²は1, 4 - シクロヘキシレンおよび1, 4 - フェニレンである。

【0017】

Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴は独立して単結合または炭素数1 ~ 4のアルキレンであり、このアルキレンにおいて任意の - CH₂ - は - O -、- S -、- CO -、または - SiH₂ - で置き換えられてもよく、任意の - (CH₂)₂ - は - CH = CH -、または - C - C -、- CO -、または - SiH₂ - で置き換えられてもよい。

30

【0018】

好ましいZ¹、Z²、Z³、およびZ⁴は、単結合、- (CH₂)₂ -、- CH = CH -、- CH₂O -、- OCH₂ -、- (CH₂)₄ -、- C - C -、- COO -、- OCO -、- CH₂CO -、- COCH₂ -、- CH₂SiH₂ -、- SiH₂CH₂ -、- O(CH₂)₂O -、- (CH₂)₂COO -、- (CH₂)₂OCO -、- COO(CH₂)₂ -、- OCO(CH₂)₂ -、- CH = CH - CH₂O -、および - OCH₂ - CH = CH - である。- CH = CH -、- CH = CH - CH₂O -、および - OCH₂ - CH = CH - のような結合基の二重結合に関する立体配置はシスよりもトランスが好ましい。

40

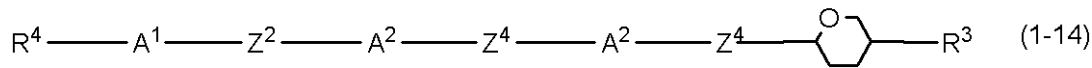
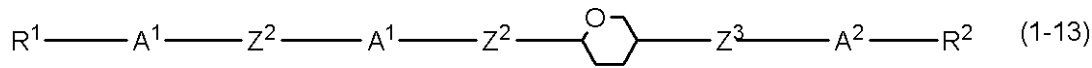
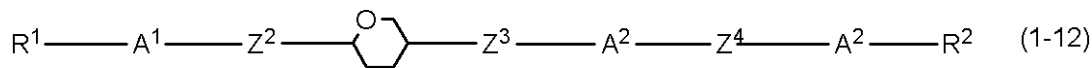
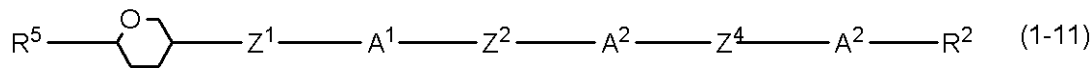
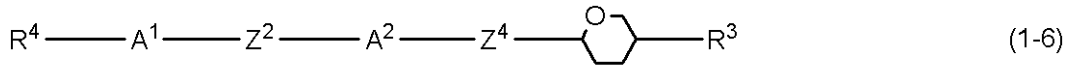
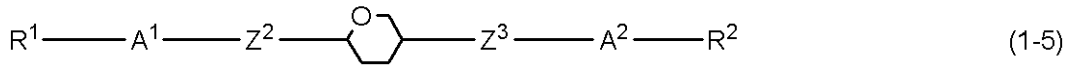
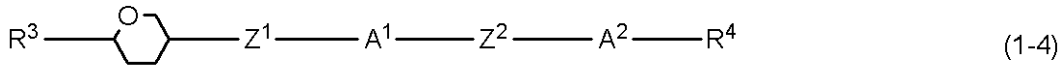
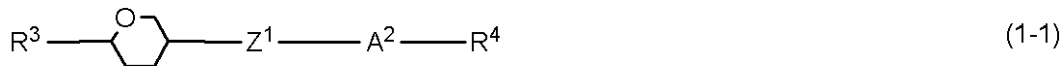
【0019】

さらに好ましいZ¹、Z²、Z³、およびZ⁴は、単結合、- (CH₂)₂ -、- CH = CH -、- CH₂O -、- OCH₂ -、- (CH₂)₄ -、および - C - C - である。最も好ましいZ¹、Z²、Z³、およびZ⁴は、単結合、- (CH₂)₂ -、および - CH = CH - である。

【0020】

2 . 式(1 - 1)、式(1 - 2)、式(1 - 4) ~ 式(1 - 6)、および式(1 - 11) ~ 式(1 - 14)で表される項1に記載の化合物。

50



式(1-1)、式(1-2)、式(1-4)~式(1-6)、および式(1-11)~式(1-14)において、 R^1 、 R^2 、および R^4 は独立して水素または炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく； R^3 および R^5 は独立して炭素数1~10のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-\text{CH}_2-$ は、 $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく； A^1 および A^2 は独立して1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、またはナフタレン-2,6-ジイルであり、これらの環において一つの $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ で置き換えられてもよく、1,4-フェニレンにおいて一つの $-\text{CH}=\text{CH}-$ は $-\text{N}=\text{N}-$ で置き換えられてもよく、そしてこれらの環において一つの水素はハロゲン、 $-\text{CF}_3$ 、 $-\text{CHF}_2$ 、 $-\text{CHF}_2\text{F}$ 、 $-\text{OCF}_3$ 、 $-\text{OCHF}_2$ 、または $-\text{OCH}_2\text{F}$ で置き換えられてもよく； Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 は独立して単結合または炭素数1~4のアルキレンであり、このアルキレンにおいて任意の $-\text{CH}_2-$ は $-\text{O}-$ 、 $-\text{S}-$ 、 $-\text{CO}-$ 、または $-\text{SiH}_2-$ で置き換えられてもよく、そして任意の $-(\text{CH}_2)_2-$ は $-\text{CH}=\text{CH}-$ または $-\text{C}=\text{C}-$ で置き換えられてもよく；式(1-1)において A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つはアルケニルであり；式(1-2)において A^1 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つはアルケニルであり；式(1-4)において A^1 および A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つはアルケニルであり；式(1-6)において A^1 が1,4-シクロヘキシレン、そして A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つはアルケニルであり；式(1-6)において A^1 が1,4-シクロヘキシレン、そして A^2 が2-フルオロ-1,4-フェニレンのとき、 R^3 はアルコキシまたはアルケニルであり；式(1-6)において A^1 、 A^2 が1,4-フェニレンのとき、 R^3 および R^4 の少なくとも一つは

10

20

30

40

50

アルケニルであり；式(1-14)においてA¹が1,4-シクロヘキシレンであり、A²が1,4-フェニレンのとき、R³およびR⁴の少なくとも一つはアルケニルである。

【0021】

3. 項2に記載の式(1-1)、式(1-2)、式(1-4)～式(1-6)、および式(1-11)～式(1-14)において、R¹～R⁵が独立して炭素数2から10のアルキル、炭素数2から10のアルケニル、炭素数1から9のアルコキシ、炭素数2から9のアルコシアルキル、炭素数3から9のアルケニルオキシ、炭素数2から10のポリフルオロアルキル、炭素数1から9のポリフルオロアルコキシ、または炭素数2から10のポリフルオロアルケニルであり；A¹およびA²が独立して1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、3-フルオロ-1,4-フェニレン、デカヒドロナフタレン-2,6-ジイル、1,2,3,4-テトラヒドロナフタレン-2,6-ジイル、またはナフタレン-2,6-ジイルであり；Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴が独立して単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、-CH₂O-、-OCH₂-、-(CH₂)₄-、-C-C-、-COO-、-OCO-、-C-C-、-CH₂CO-、-COCH₂-、-CH₂SiH₂-、-SiH₂CH₂-、-O(CH₂)₂O-、-(CH₂)₂COO-、-(CH₂)₂OCO-、-COO(CH₂)₂-、-OCO(CH₂)₂-、-CH=CH-CH₂O-、または-OCH₂-CH=CH-である項2に記載の化合物。

10

【0022】

4. 項2に記載の式(1-1)、式(1-2)、式(1-4)～式(1-6)、および式(1-11)～式(1-14)において、R¹～R⁵が独立して炭素数2～10のアルキル、炭素数2～10のアルケニル、炭素数1～9のアルコキシ、炭素数2～9のアルコシアルキル、または炭素数3～9のアルケニルオキシであり；A¹およびA²が独立して1,4-シクロヘキシレン、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または3-フルオロ-1,4-フェニレンであり；Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴が独立して単結合、-(CH₂)₂-、-CH=CH-、-CH₂O-、-OCH₂-、-(CH₂)₄-、または-C-C-である項2に記載の化合物。

20

【0023】

5. 項2に記載の式(1-1)、式(1-2)、式(1-4)～式(1-6)、および式(1-11)～式(1-14)において、R¹～R⁵が独立して炭素数2～10のアルキル、炭素数2～10のアルケニル、または炭素数1～9のアルコキシであり；A¹およびA²が独立して1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり；Z¹、Z²、Z³、およびZ⁴が独立して単結合、-(CH₂)₂-、または-CH=CH-である項2に記載の化合物。

30

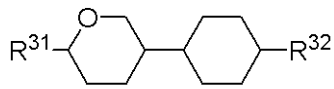
【0024】

6. 項2に記載の式(1-1)および式(1-2)において、A¹およびA²が1,4-シクロヘキシレンであり；項2に記載の式(1-4)～式(1-6)において、A¹およびA²が独立して1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、A¹およびA²の少なくとも一つが1,4-シクロヘキシレンであり；項2に記載の式(1-11)～式(1-14)において、A¹およびA²が独立して1,4-シクロヘキシレンまたは1,4-フェニレンであり、A¹およびA²の少なくとも二つが1,4-シクロヘキシレンである項2に記載の化合物。

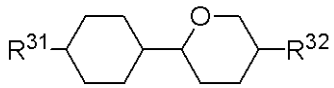
40

【0025】

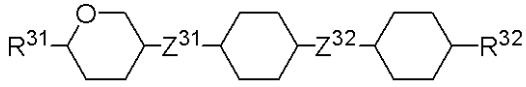
7. 式(1-1-1)、式(1-2-1)、式(1-4-1)～式(1-4-3)、式(1-5-1)～式(1-5-3)、式(1-6-1)～式(1-6-3)、式(1-11-1)～式(1-11-4)、式(1-12-1)～式(1-12-4)、式(1-13-1)～式(1-13-4)、式(1-14-1)～式(1-14-4)のいずれか一つで表される項2～6のいずれか1項に記載の化合物。



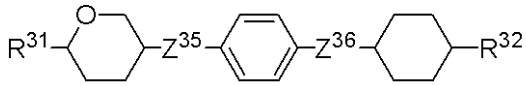
(1-1-1)



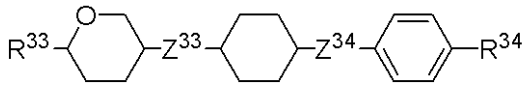
(1-2-1)



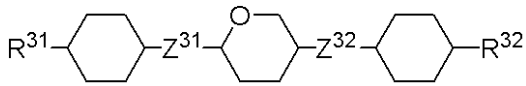
(1-4-1)



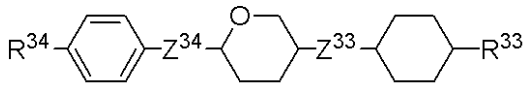
(1-4-2)



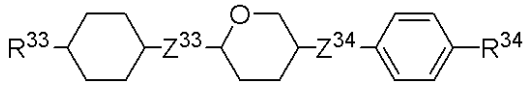
(1-4-3)



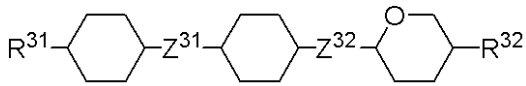
(1-5-1)



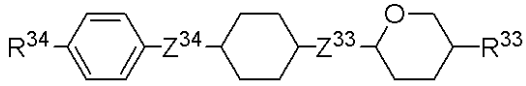
(1-5-2)



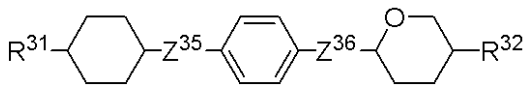
(1-5-3)



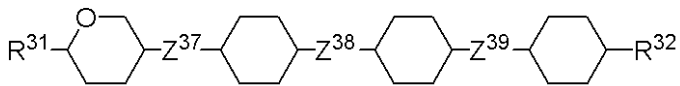
(1-6-1)



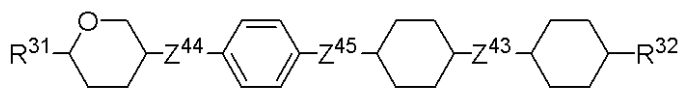
(1-6-2)



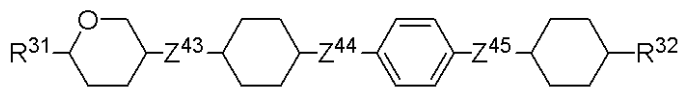
(1-6-3)



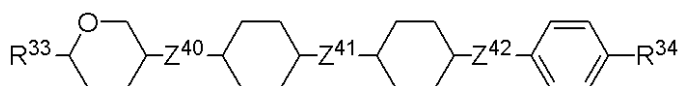
(1-11-1)



(1-11-2)



(1-11-3)



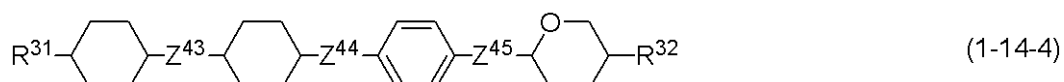
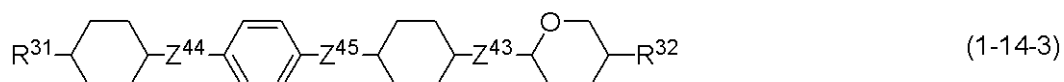
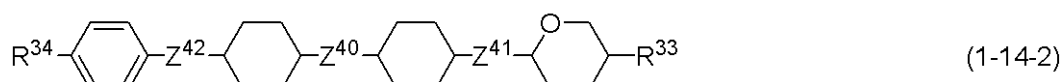
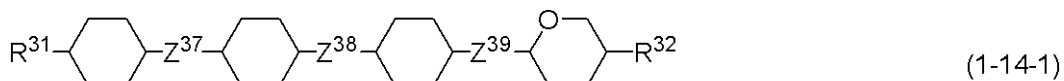
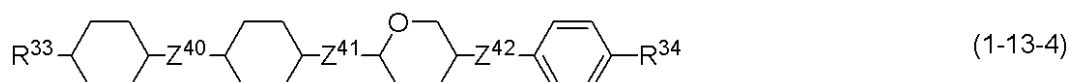
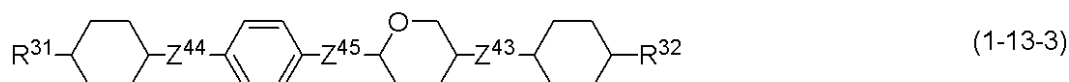
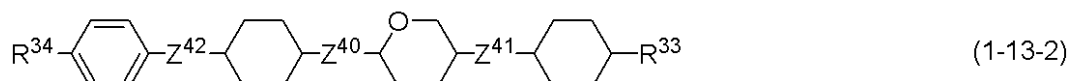
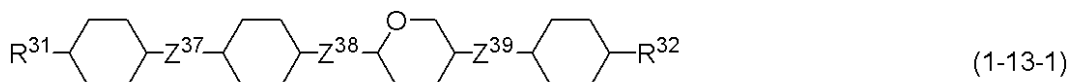
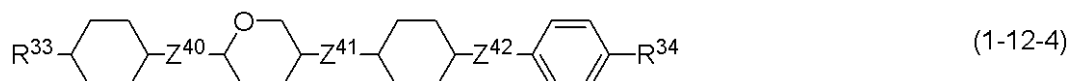
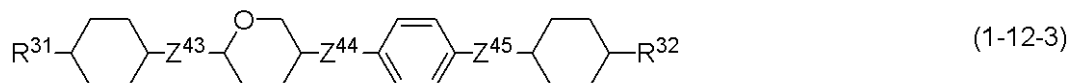
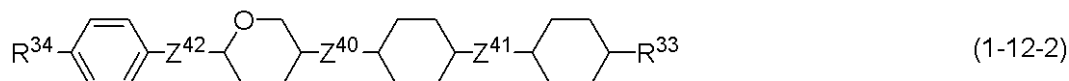
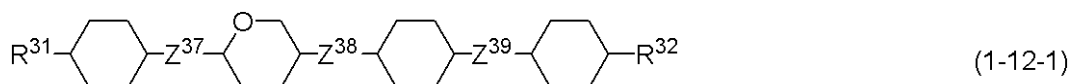
(1-11-4)

10

20

30

40



式(1-1-1)、式(1-2-1)、式(1-4-1)~式(1-4-3)、式(1-5-1)~式(1-5-3)、式(1-6-1)~式(1-6-3)、式(1-11-1)~式(1-11-4)、式(1-12-1)~式(1-12-4)、式(1-13-1)~式(1-13-4)、式(1-14-1)~式(1-14-4)において、 R^{31} 、 R^{32} 、および R^{33} は独立して炭素数2~10のアルキル、炭素数1~9のアルコキシまたは炭素数2~10のアルケニルであり； R^{34} は炭素数2~10のアルキル、炭素数1~9のアルコキシ、または1-アルケニル以外の炭素数2~10のアルケニルであり； R^{31} および R^{32} のいずれか1つはアルキルであり； R^{33} または R^{34} のいずれか1つはアルキルであり； Z^{31} 、 Z^{32} 、 Z^{33} 、 Z^{37} 、 Z^{38} 、 Z^{39} 、 Z^{40} 、 Z^{41} 、または Z^{43} は独立して単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ であり； Z^{34} 、 Z^{35} 、 Z^{36} 、 Z^{42} 、 Z^{44} 、または Z^{45} は独立して単結合、または $-(CH_2)_2-$ であり； Z^{31} および Z^{32} のいずれか1つは単結合であり； Z^{33} および

10

20

30

40

50

Z³⁴ のいずれか 1 つは単結合であり； Z³⁵ および Z³⁶ のいずれか 1 つは単結合であり； Z³⁷ , Z³⁸ , および Z³⁹ のいずれか 2 つは単結合であり； Z⁴⁰ , Z⁴¹ , および Z⁴² のいずれか 2 つは単結合であり； Z⁴³ , Z⁴⁴ , および Z⁴⁵ のいずれか 2 つは単結合である。

【 0 0 2 6 】

8 . 式 (1 - 1 - 1) および (1 - 2 - 1) のいずれか一つで表される化合物。



式 (1 - 1 - 1)、式 (1 - 2 - 1) において、 R³¹、および R³² は独立して炭素数 2 ~ 10 のアルキル、炭素数 1 ~ 9 のアルコキシまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R³¹ および R³² の一方はアルキルである。

【 0 0 2 7 】

9 . 式 (1 - 4 - 1)、(1 - 5 - 1) および (1 - 6 - 1) のいずれか一つで表される化合物。



式 (1 - 4 - 1)、式 (1 - 5 - 1)、式 (1 - 6 - 1) において、 R³¹、および R³² は独立して炭素数 2 ~ 10 のアルキル、炭素数 1 ~ 9 のアルコキシまたは炭素数 2 ~ 10 のアルケニルであり； R³¹ および R³² の一方はアルキルであり； Z³¹ , または Z³² は独立して単結合、 - (C H ₂) ₂ -、または - C H = C H - であり；そして Z³¹ または Z³² のいずれか 1 つは単結合である。

【 0 0 2 8 】

10 . 式中の R³¹ および R³² の一方がアルキルであり、もう一方がアルケニルである項 8 または 9 記載の化合物。

【 0 0 2 9 】

11 . 式中の R³¹ および R³² がアルケニルである項 8 または 9 記載の化合物。

【 0 0 3 0 】

12 . 項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載した少なくとも 1 つの化合物を含有する液晶組成物。

【 0 0 3 1 】

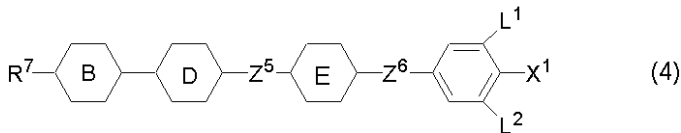
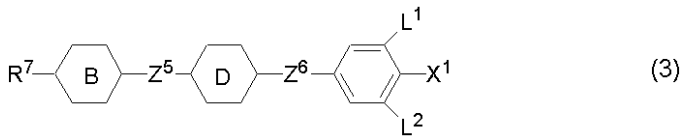
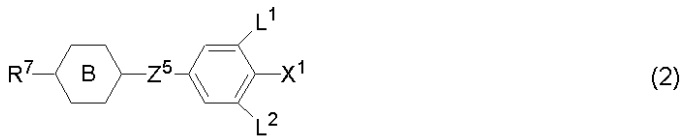
13 . 下記の式 (2)、(3) および (4) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する項 12 に記載の液晶組成物。

10

20

30

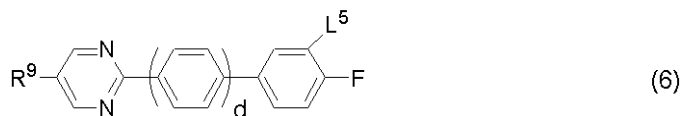
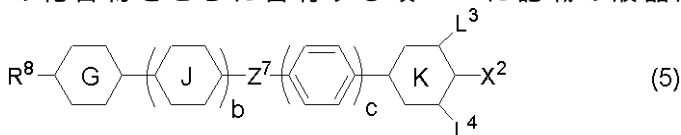
40



式中、 R^7 は炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^1 はフッ素、塩素、 $-OCF_3$ 、 $-OCHF_2$ 、 $-CF_3$ 、 $-CH_2F$ 、 $-OCF_2CHF_2$ 、または $-OCF_2CHFCF_3$ であり；環 B、D および環 D は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイルまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり、環 E は 1, 4 - シクロヘキシレンまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり； Z^5 、および Z^6 は独立して $-(CH_2)_2-$ 、 $-(CH_2)_4-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、または単結合であり；そして L^1 および L^2 は独立して水素またはフッ素である。

【0032】

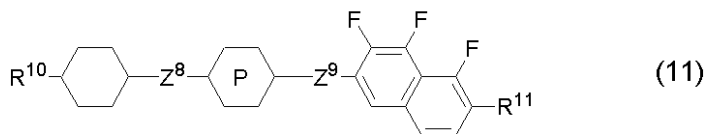
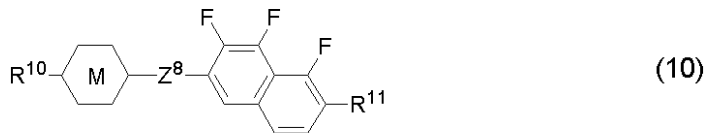
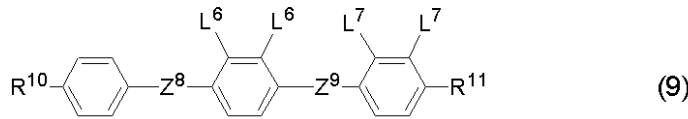
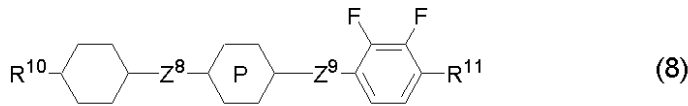
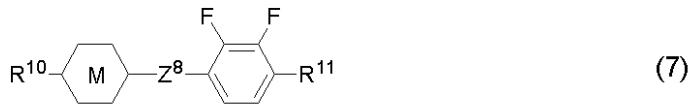
14. 下記の式 (5) および (6) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する項 12 に記載の液晶組成物。



式中、 R^8 および R^9 は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく； X^2 は $-CN$ または $-C(C)CN$ であり；環 G は 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレン、1, 3 - ジオキサン - 2, 5 - ジイル、またはピリミジン - 2, 5 - ジイルであり；環 J は 1, 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2, 5 - ジイルまたは任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり；環 K は 1, 4 - シクロヘキシレンまたは 1, 4 - フェニレンであり； Z^7 は $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ 、 $-CF_2O-$ 、 $-OCF_2-$ 、または単結合であり； L^3 、 L^4 および L^5 は独立して水素またはフッ素であり；そして b、c および d は独立して 0 または 1 である。

【0033】

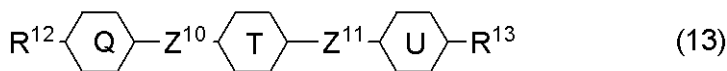
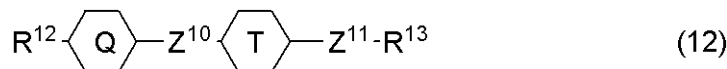
15. 下記の式 (7)、(8)、(9)、(10)、および (11) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する項 12 に記載の液晶組成物。



式中、 R^{10} および R^{11} は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく、あるいは R^{10} はフッ素であってもよく；環 M および環 P は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、1, 4 - フェニレンまたはデカヒドロ - 2, 6 - ナフチレンであり； Z^8 および Z^9 は独立して $-(CH_2)_2-$ 、 $-COO-$ または単結合であり；そして L^6 および L^7 は独立して水素またはフッ素であり、 L^6 と L^7 の少なくとも一つはフッ素である。

【0034】

16. 下記の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する項 12 に記載の液晶組成物。



式中、 R^{12} および R^{13} は独立して炭素数 1 ~ 10 のアルキルであり、このアルキルにおいて任意の $-CH_2-$ は $-O-$ または $-CH=CH-$ で置き換えられてもよく、そして任意の水素はフッ素で置き換えられてもよく；環 Q、環 T および環 U は独立して 1, 4 - シクロヘキシレン、ピリミジン - 2, 5 - ジイル、または任意の水素がフッ素で置き換えられてもよい 1, 4 - フェニレンであり；そして Z^{10} および Z^{11} は独立して $-C-C-$ 、 $-COO-$ 、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH=CH-$ 、または単結合である。

【0035】

17. 項 14 に記載の式 (5) および (6) で表される化合物の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有する項 13 に記載の組成物。

【0036】

18. 項 16 に記載の式 (12)、(13) および (14) で表される化合物の群から選

10

20

30

40

50

択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する項13に記載の組成物。

【0037】

19. 項16に記載の式(12)、(13)および(14)で表される化合物の群から選
択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する項14に記載の組成物。

【0038】

20. 項16に記載の式(12)、(13)および(14)で表される化合物の群から選
択された少なくとも1つの化合物をさらに含有する項15に記載の組成物。

【0039】

21. 少なくとも一つの光学活性化合物をさらに含有する項12~20のいずれか1項に
記載の液晶組成物。

10

【0040】

22. 液晶性化合物の全重量に基づいて、第一成分の割合が5~90重量%の範囲である
項12~21のいずれか1項に記載の液晶組成物。

【0041】

23. 項12~22のいずれか1項に記載の液晶組成物を含有する液晶表示素子。

【0042】

24. VAまたはECB効果に基づくアクティブマトリックス駆動を有する項23に記載
の液晶表示素子。

【0043】

25. 項12~22のいずれか1項に記載の液晶組成物の液晶表示素子における使用。

20

【発明の効果】

【0044】

本発明の化合物は、化合物に必要な一般的物性、熱、光などに対する安定性、適切な光
学異方性、適切な誘電率異方性、他の液晶性化合物との優れた相溶性を有する。本発明の
液晶組成物は、これらの化合物の少なくとも一つを含有し、そしてネマチック相の高い上
限温度、ネマチック相の低い下限温度、小さな粘度、適切な光学異方性、低いしきい値電
圧を有する。本発明の液晶表示素子は、この組成物を含有し、そして使用できる広い温度
範囲、短い応答時間、大きなコントラスト比、低い駆動電圧を有する。

【発明を実施するための形態】

【0045】

この明細書における用語の使い方は次のとおりである。液晶性化合物は、ネマチック相
、スメクチック相などの液晶相を有する化合物および液晶相を有しないが液晶組成物の成
分として有用な化合物の総称である。液晶性化合物、液晶組成物、液晶表示素子をそれぞ
れ化合物、組成物、素子と略すことがある。液晶表示素子は液晶表示パネルおよび液晶表
示モジュールの総称である。ネマチック相の上限温度はネマチック相-等方相の相転移温
度であり、そして単に上限温度と略すことがある。ネマチック相の下限温度を単に下限温
度と略すことがある。式(1)で表わされる化合物を化合物(1)と略すことがある。こ
の略記は式(2)などで表される化合物にも適用することがある。式(1)から式(11
)において、A¹、B¹、E、Mなどの記号はそれぞれ環A¹、環B¹、環E、環Mなど
に対応する。成分または液晶性化合物の割合(百分率)は、液晶性化合物の全重量に基づ
いた重量百分率(重量%)である。以下に本発明をさらに説明する。

30

40

【0046】

第一に、本発明の化合物(1)をさらに説明する。ナフタレン環などの縮合環は一環と
数える。化合物(1)はテトラヒドロピラン環を有する二環、三環および四環の化合物で
ある。この化合物は、素子が通常使用される条件下において物理的および化学的に極めて
安定であり、そして他の液晶性化合物との相溶性がよい。この化合物を含有する組成物は
素子が通常使用される条件下で安定である。この組成物を低い温度で保管しても、この化
合物が結晶(またはスメクチック相)として析出することがない。この化合物は、化合物
に必要な一般的物性、適切な光学異方性、そして適切な誘電率異方性を有する。

【0047】

50

化合物(1)の末端基、環および結合基を適切に選択することによって、光学異方性などの物性を任意に調整することが可能である。末端基 R^1 および R^2 、環 A^1 および A^2 、結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 の種類が、化合物(1)の物性に与える効果を以下に説明する。

【0048】

R^1 または R^2 が直鎖であるときは液晶相の温度範囲が広くそして粘度が小さい。 R^1 または R^2 が分岐鎖であるときは他の液晶性化合物との相溶性がよい。 R^1 または R^2 が光学活性基である化合物は、キラルドーパントとして有用である。この化合物を組成物に添加することによって、素子に発生するリバース・ツイスト・ドメイン(Reverse twisted domain)を防止することができる。 R^1 または R^2 が光学活性基でない化合物は組成物の成分として有用である。 R^1 または R^2 がアルケニルであるとき、好ましい立体配置は二重結合の位置に依存する。好ましい立体配置を有するアルケニル化合物は、高い上限温度または液晶相の広い温度範囲を有する。Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 109およびMol. Cryst. Liq. Cryst., 1985, 131, 327に詳細な説明がある。

10

【0049】

環 A^1 または A^2 が、1,4-フェニレン、2-フルオロ-1,4-フェニレン、または3-フルオロ-1,4-フェニレンであるときは光学異方性が大きい。環 A^1 および A^2 が、1,4-シクロヘキシレンであるときは光学異方性が小さい。

【0050】

少なくとも二つの環が1,4-シクロヘキシレンであるときは、上限温度が高く、光学異方性が小さく、そして粘度が小さい。少なくとも一つの環が1,4-フェニレンのときは、光学異方性が比較的大きく、そして配向秩序パラメータ(orientational order parameter)が大きい。

20

【0051】

結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、または Z^4 が単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、 $-CH_2O-CH=CH-$ 、または $-(CH_2)_4-$ であるときは粘度が小さい。結合基が単結合、 $-(CH_2)_2-$ 、または $-CH=CH-$ であるときは粘度がより小さい。結合基が $-CH=CH-$ であるときは液晶相の温度範囲が広く、そして弾性定数比 K_{33}/K_{11} (K_{33} :ベンド弾性定数、 K_{11} :スプレッド弾性定数)が大きい。結合基が $-C=C-$ のときは光学異方性が大きい。

30

【0052】

化合物(1)が二環または三環を有するときは粘度が小さい。化合物(1)が三環または四環を有するときは上限温度が高い。以上のように、末端基、環および結合基の種類、環の数を適当に選択することにより目的の物性を有する化合物を得ることができる。したがって、化合物(1)はPC、TN、STN、ECB、OCB、IPS、VAなどの素子に用いられる組成物の成分として有用である。

【0053】

化合物(1)の好ましい例は、本発明の項2に記載した化合物(1-1)、(1-2)、(1-4)~(1-6)、および(1-11)~(1-14)である。これらの化合物における R^1 、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^6 、 A^1 、 A^2 、 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 、および Z^4 の記号の意味は、項2に記載した記号の意味と同一である。

40

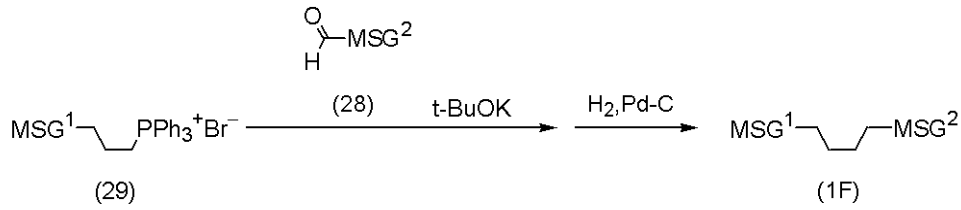
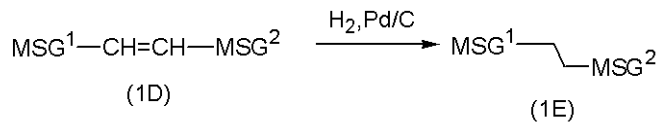
【0054】

化合物(1)は有機合成化学における手法を適切に組み合わせることにより合成する。出発物に目的の末端基、環および結合基を導入する方法は、オーガニックシンセシス(Organic Syntheses, John Wiley & Sons, Inc)、オーガニック・リアクションズ(Organic Reactions, John Wiley & Sons, Inc)、コンプリヘンシブ・オーガニック・シンセシス(Comprehensive Organic Synthesis, Pergamon Press)、新実験化学講座(丸善)などの成書に記載されている。

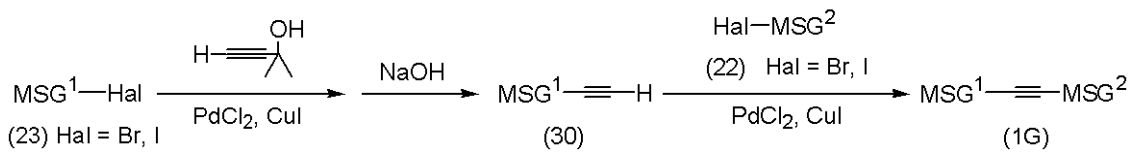
【0055】

結合基 Z^1 、 Z^2 、 Z^3 または Z^4 を生成する方法の一例に関して、最初にスキームを

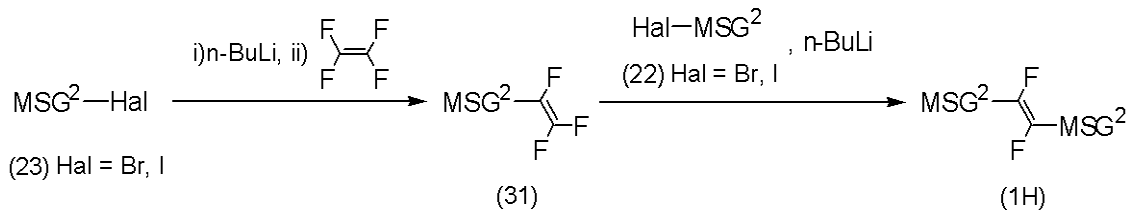
50



10

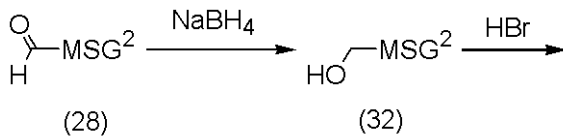


【 0 0 5 8 】

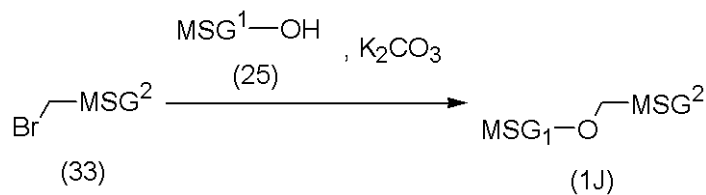


20

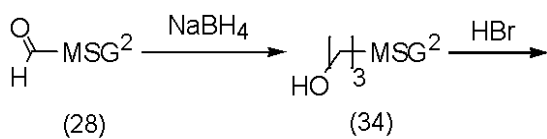
【 0 0 5 9 】



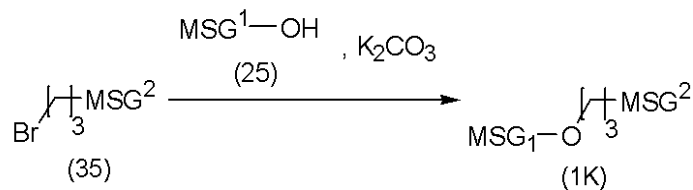
30



【 0 0 6 0 】



40



【 0 0 6 1 】

(I) 単結合の生成

アリールホウ酸 (2 1) と公知の方法で合成される化合物 (2 2) とを、炭酸塩水溶液とテトラキス (トリフェニルホスフィン) パラジウムのような触媒の存在下で反応させて化合物 (1 A) を合成する。この化合物 (1 A) は、公知の方法で合成される化合物 (2

50

3) に *n*-ブチルリチウムを、次いで塩化亜鉛を反応させ、ジクロロビス(トリフェニルホスフィン)パラジウムのような触媒の存在下で化合物(22)を反応させることによっても合成される。

【0062】

(II) -COO- と -OCO- の生成

化合物(23)に *n*-ブチルリチウムを、続いて二酸化炭素を反応させてカルボン酸(24)を得る。化合物(24)と、公知の方法で合成されるフェノール(25)とをDDC(1,3-ジシクロヘキシルカルボジイミド)とDMAPI(4-ジメチルアミノピリジン)の存在下で脱水させて-COO-を有する化合物(1B)を合成する。この方法によって-OCO-を有する化合物も合成する。

10

【0063】

(III) -CF₂O- と -OCF₂- の生成

化合物(1B)をローソン試薬のような硫黄化剤で処理して化合物(26)を得る。化合物(26)をフッ化水素ピリジン錯体とNBS(N-ブロモスクシンイミド)でフッ素化し、-CF₂O-を有する化合物(1C)を合成する。M. Kuroboshi et al., Chem. Lett., 1992, 827.を参照。化合物(1C)は化合物(26)を(ジエチルアミノ)サルファートリフルオリド(DAST)でフッ素化しても合成される。W. H. Bunnelle et al., J. Org. Chem. 1990, 55, 768.を参照。この方法によって-OCF₂-を有する化合物も合成する。Peer. Kirsch et al., Anbew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 1480.に記載の方法によってこれらの結合基を生成させることも可能である。

20

【0064】

(IV) -CH=CH- の生成

化合物(23)を *n*-ブチルリチウムで処理した後、N,N-ジメチルホルムアミド(DMF)などのホルムアミドと反応させてアルデヒド(28)を得る。公知の方法で合成されるホスホニウム塩(27)をカリウム *tert*-ブトキシドのような塩基で処理して発生させたリンイリドを、アルデヒド(28)に反応させて化合物(1D)を合成する。反応条件によってはシス体が生成するので、必要に応じて公知の方法によりシス体をトランス体に異性化する。

【0065】

(V) -(CH₂)₂- の生成

化合物(1D)をパラジウム炭素のような触媒の存在下で水素化することにより、化合物(1E)を合成する。

30

【0066】

(VI) -(CH₂)₄- の生成

ホスホニウム塩(27)の代わりにホスホニウム塩(29)を用い、項(IV)の方法に従って-(CH₂)₂-CH=CH-を有する化合物を得る。これを接触水素化して化合物(1F)を合成する。

【0067】

(VII) -C=C- の生成

ジクロロパラジウムとハロゲン化銅との触媒存在下で、化合物(23)に2-メチル-3-ブチン-2-オールを反応させたのち、塩基性条件下で脱保護して化合物(30)を得る。ジクロロパラジウムとハロゲン化銅との触媒存在下、化合物(30)を化合物(22)と反応させて、化合物(1G)を合成する。

40

【0068】

(VIII) -CF=CF- の生成

化合物(23)を *n*-ブチルリチウムで処理したあと、テトラフルオロエチレンを反応させて化合物(31)を得る。化合物(22)を *n*-ブチルリチウムで処理したあと化合物(31)と反応させて化合物(1H)を合成する。

【0069】

(IX) -CH₂O- または -OCH₂- の生成

50

化合物(28)を水素化ホウ素ナトリウムなどの還元剤で還元して化合物(32)を得る。これを臭化水素酸などでハロゲン化して化合物(33)を得る。炭酸カリウムなどの存在下で、化合物(33)を化合物(25)と反応させて化合物(1J)を合成する。

【0070】

(X) - (CH₂)₃O - または - O(CH₂)₃ - の生成

化合物(32)の代わりに化合物(34)を用いて、項(IX)の方法に従って化合物(1K)を合成する。

【0071】

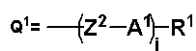
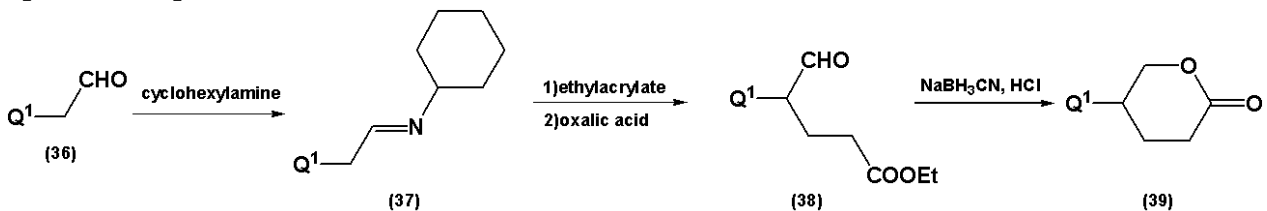
(XI) - (CF₂)₂ - の生成

J. Am. Chem. Soc., 2001, 123, 5414.に記載された方法に従い、ジケトン(-COCO-)をフッ化水素触媒の存在下、四フッ化硫黄でフッ素化して-(CF₂)₂-を有する化合物を得る。

【0072】

次に i = 0、k > 0、そして n = 0 のとき、式(1)で表されるテトラヒドロピラン化合物を合成する方法の一例を下記のスキームに示す。初めにラクトン骨格を有する合成中間体(39)を合成するスキームを説明し、次いで(39)を出発物質としたテトラヒドロピラン化合物(42)を合成する方法の一例を述べる。

【0073】



【0074】

化合物(36)~(39)において、Q²は式(1)の構造単位である。構造単位はスキームに示した。これらの化合物におけるR¹、A²、およびZ²の記号の意味は、項1に記載した記号の意味と同一である。

【0075】

すなわち、化合物(37)は、化合物(36)とシクロヘキシルアミンとの反応によって合成する。これらの反応は、好ましくはジエチルエーテル等の溶媒中、炭酸カリウムなどの塩基の存在下、室温から溶媒の沸点までの間の温度で行う。化合物(38)は、化合物(37)にアクリル酸エチルを付加させた後、脱保護することによって合成する。この反応は、アクリル酸エチル自身を溶媒として用いるのが好ましいが、化合物(37)やアクリル酸エチルと反応しないトルエンなどを溶媒として使用しても良い。アクリル酸エチルの重合を防ぐため、ヒドロキノンなどの重合禁止剤を共存させることが好ましい。この反応は、通常ガラス反応器を用いる場合は室温から溶媒の沸点までの間の温度で行うが、ステンレス製オートクレーブなどの耐圧反応器を用いて溶媒の沸点以上の温度で反応を行うこともできる。付加反応が十分に進行した後、シュウ酸などの酸を添加することにより、シクロヘキシルアミンを脱離させ、化合物(38)を得る。化合物(39)は、化合物(38)の環化反応によって合成する。この反応は、好ましくはイソプロパノールなどの溶媒中、シアノ水素化ホウ素ナトリウムの存在下、室温程度の温度で行う。反応を促進させるために塩酸などの酸を添加してもよい。

出発物である化合物(36)は有機合成化学の方法に従って容易に合成することができる。

【0076】

次に、化合物(42)に関する合成法の一例を示す。

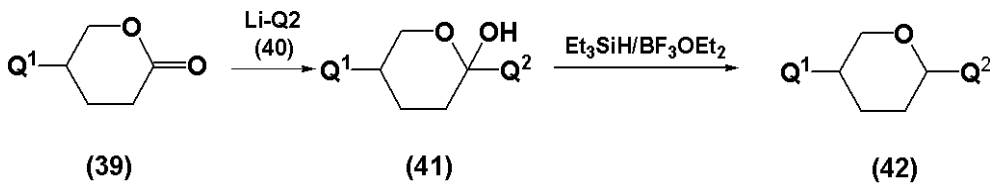
10

20

30

40

50



化合物(39)~(42)において、 Q^1 または Q^2 は式(1)の構造単位である。構造単位はスキームに示した。これらの化合物における R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 Z^2 、および Z^3 の記号の意味は、項1に記載した記号の意味と同一である。

10

【0077】

すなわち、化合物(41)は、化合物(39)と化合物(40)との反応によって合成する。この反応は、好ましくはテトラヒドロフラン等の溶媒中、 -30 の温度で行う。化合物(42)は、化合物(41)をジクロロメタンなどの溶媒中、トリエチルシラン、三フッ化ホウ素ジエチルエーテル錯体の共存下、 -50 以下の温度で反応させることによって合成する。

化合物(40)は有機合成化学の方法に従って容易に合成することができる。

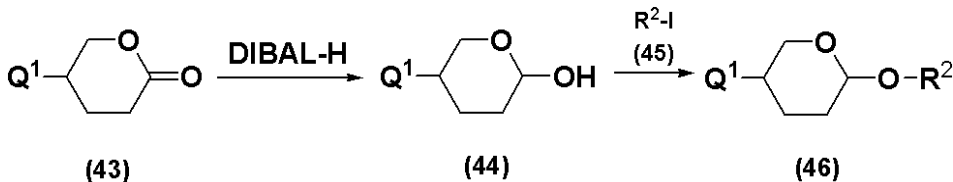
【0078】

20

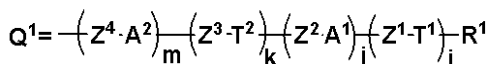
$i = 0$ 、 $k > 0$ 、そして $n = 0$ 以外のとき、式(1)で表されるテトラヒドロピラン化合物についても、同様の方法で合成することができる。

【0079】

次に、テトラヒドロピラン化合物(46)を合成する方法の一例を述べる。



30



化合物(43)~(46)において、 Q^1 または Q^2 は式(1)の構造単位である。構造単位はスキームに示した。これらの化合物における R^1 、 R^2 、 A^1 、 A^2 、 Z^2 、および Z^3 の記号の意味は、項1に記載した記号の意味と同一である。

【0080】

化合物(44)は、化合物(43)をDIBAL-Hで還元することにより得られる。この反応は、好ましくはトルエン等の溶媒中、 -60 以下の温度で行う。化合物(46)は、炭酸カリウムなどの存在下で、化合物(44)を化合物(45)と反応させることにより合成する。

40

化合物(45)は有機合成化学の方法に従って容易に合成することができる。

【0081】

第二に、本発明の組成物をさらに説明する。好ましい組成物は化合物(1)から選択された少なくとも一つの化合物を1~99%の割合で含有する。この組成物は化合物(2)~(14)の群から選択された成分を主として含有する。

【0082】

化合物(1)を含有する好ましい組成物は次のとおりである。好ましい組成物は化合物(2)、(3)および(4)の群から選択された少なくとも一つの化合物を含有する。別の好ましい組成物は、化合物(5)および(6)の群から選択された少なくとも一つの化合物を含有する。別の好ましい組成物は、このような二つの群のそれぞれから選択された

50

少なくとも二つの化合物を含有する。これらの組成物は、液晶相の温度範囲、粘度、光学異方性、誘電率異方性、しきい値電圧などを調整する目的で、化合物(12)、(13)および(14)の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物(7)~(11)の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、AM-TN素子、STN素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

【0083】

別の好ましい組成物は、化合物(7)~(11)の群から選択された少なくとも一つの化合物を含有する。この組成物は、化合物(12)、(13)および(14)の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、物性をさらに調整する目的で、化合物(2)~(6)の群から選択された少なくとも一つの化合物をさらに含有してもよい。この組成物は、VA素子などに適合させる目的で、その他の液晶性化合物、添加物などの化合物をさらに含有してもよい。

10

【0084】

化合物(2)、(3)および(4)は、誘電率異方性が正で大きいので、AM-TN素子用の組成物に主として用いられる。この組成物において、これらの化合物の量は1~99%である。好ましい量は10~97%である。より好ましい量は40~95%である。この組成物に化合物(12)、(13)または(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

20

【0085】

化合物(5)および(6)は、誘電率異方性が正で非常に大きいので、STN素子用の組成物に主として用いられる。この組成物において、これらの化合物の量は1~99%である。好ましい量は10~97%である。より好ましい量は40~95%である。この組成物に化合物(12)、(13)または(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

【0086】

化合物(7)、(8)、(9)、(10)、および(11)は、誘電率異方性が負であるので、VA素子用の組成物に主として用いられる。これらの化合物の好ましい量は80%以下である。より好ましい量は40~80%である。この組成物に化合物(12)、(13)または(14)をさらに添加する場合、この化合物の好ましい量は60%以下である。より好ましい量は40%以下である。

30

【0087】

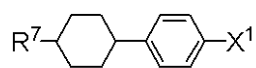
化合物(12)、(13)および(14)の誘電率異方性は小さい。化合物(12)は粘度または光学異方性を調整する目的で主に使用される。化合物(13)および(14)は上限温度を上げて液晶相の温度範囲を広げる、または光学異方性を調整する目的で使用される。化合物(12)、(13)および(14)の量を増加させると組成物のしきい値電圧が高くなり、粘度が小さくなる。したがって、組成物のしきい値電圧の要求値を満たすかぎり多量に使用してもよい。

【0088】

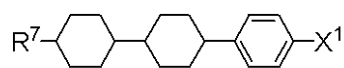
好ましい化合物(2)~(14)は、それぞれ化合物(2-1)~(2-9)、化合物(3-1)~(3-97)、化合物(4-1)~(4-33)、化合物(5-1)~(5-56)、化合物(6-1)~(6-3)、化合物(7-1)~(7-4)、化合物(8-1)~(8-6)、化合物(9-1)~(9-4)、化合物(10-1)、化合物(11-1)、化合物(12-1)~(12-11)、化合物(13-1)~(13-21)、および化合物(14-1)~(14-6)である。これらの化合物において、R⁷、R⁹、X¹およびX²の記号の意味は、化合物(2)~(14)におけるこれらの記号の意味と同一である。

40

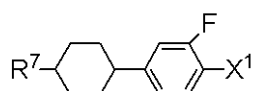
【0089】



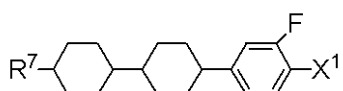
(2-1)



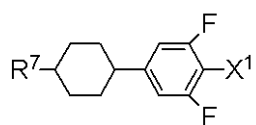
(3-1)



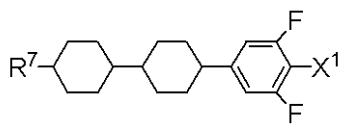
(2-2)



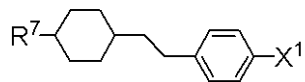
(3-2)



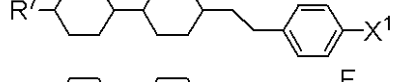
(2-3)



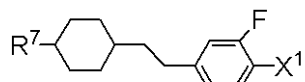
(3-3)



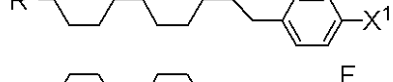
(2-4)



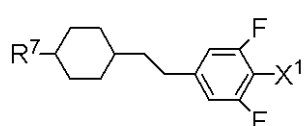
(3-4)



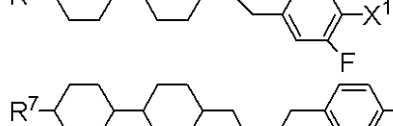
(2-5)



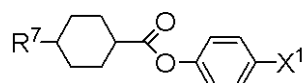
(3-5)



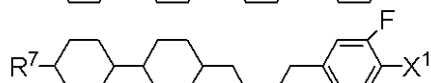
(2-6)



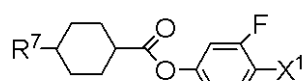
(3-6)



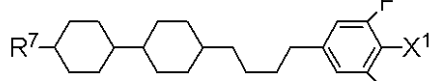
(2-7)



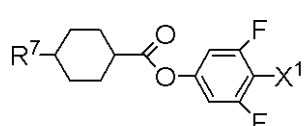
(3-7)



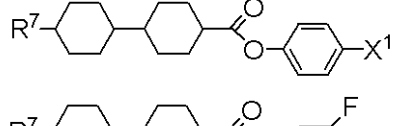
(2-8)



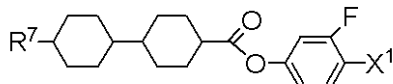
(3-8)



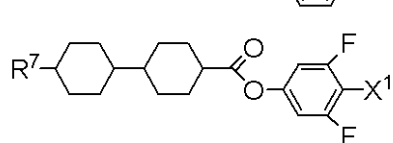
(2-9)



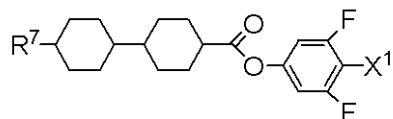
(3-9)



(3-10)



(3-11)



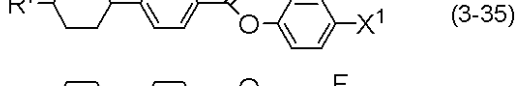
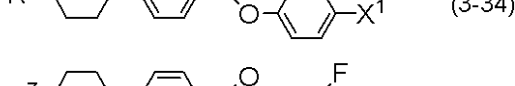
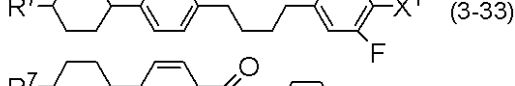
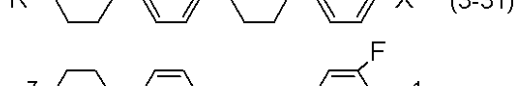
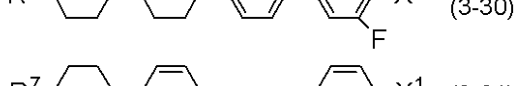
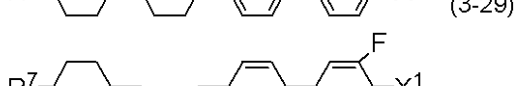
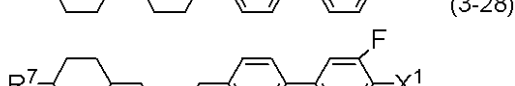
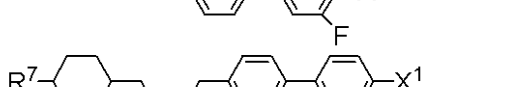
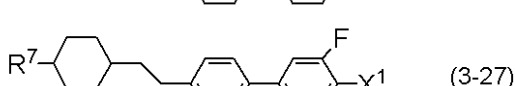
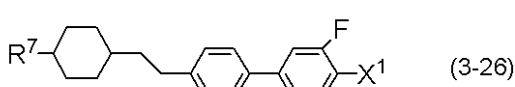
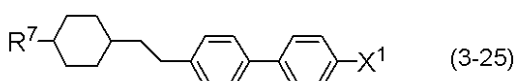
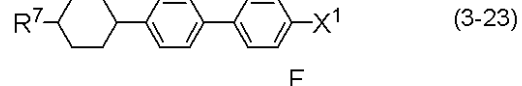
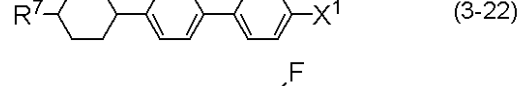
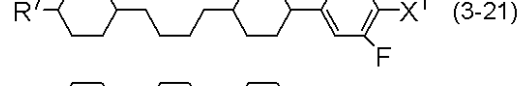
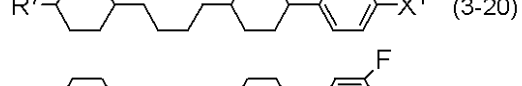
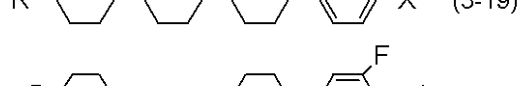
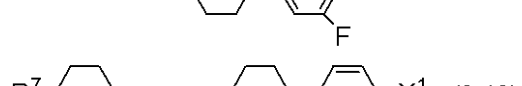
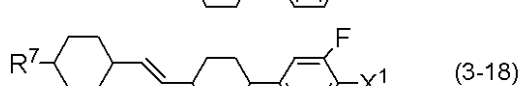
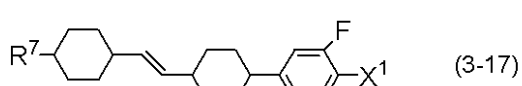
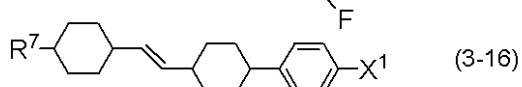
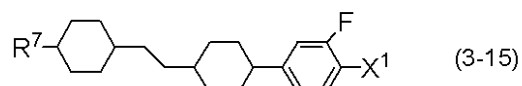
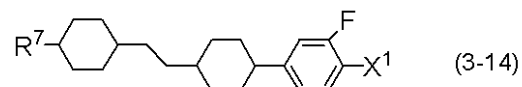
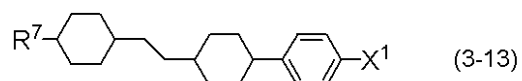
(3-12)

10

20

30

【 0 0 9 0 】

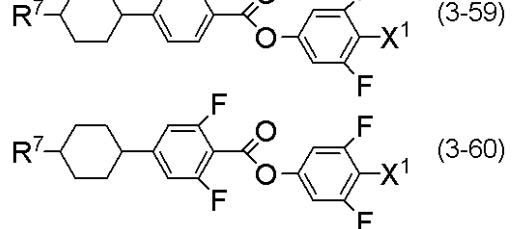
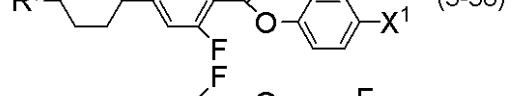
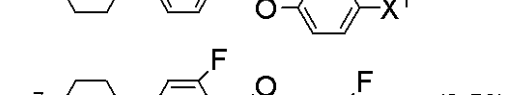
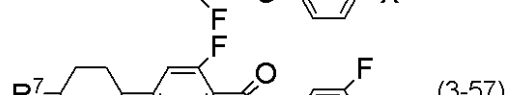
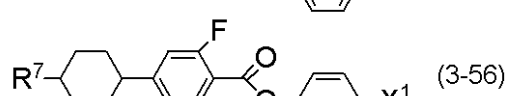
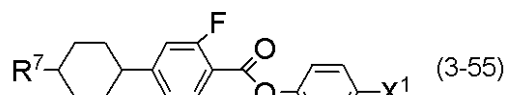
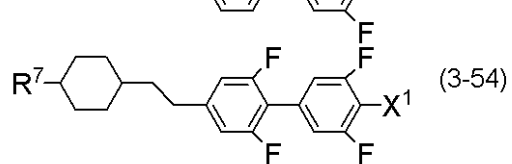
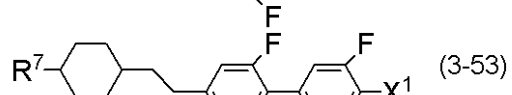
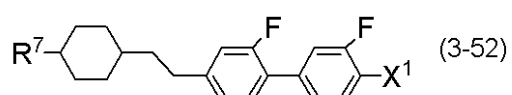
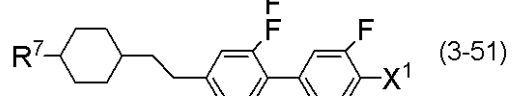
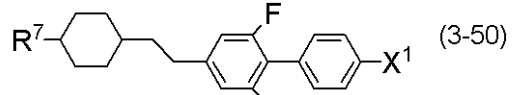
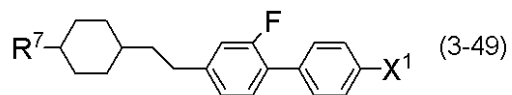
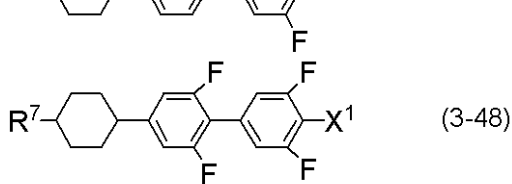
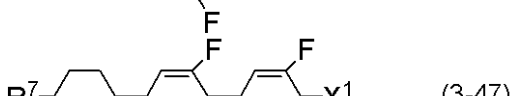
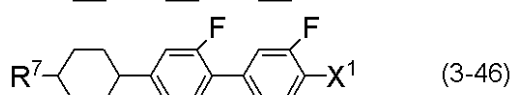
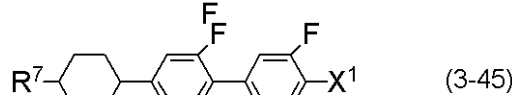
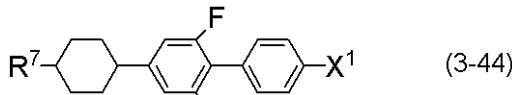
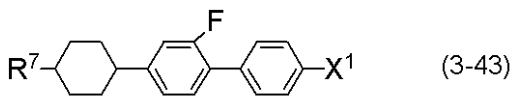
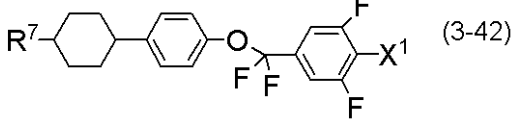
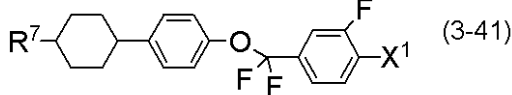
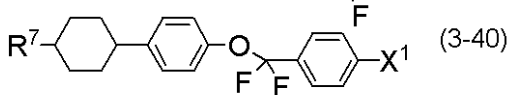
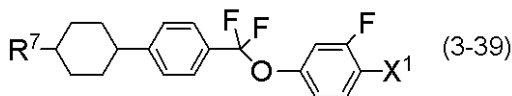
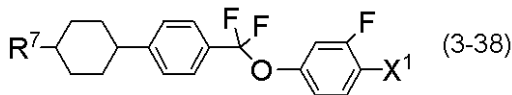
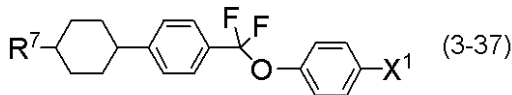


10

20

30

【 0 0 9 1 】



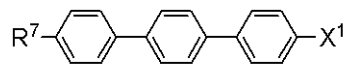
【 0 0 9 2 】

10

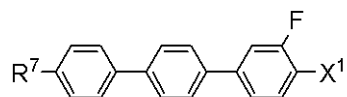
20

30

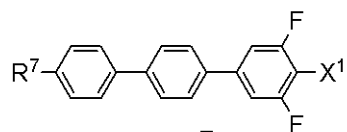
40



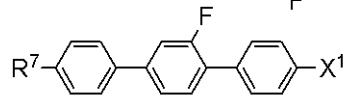
(3-61)



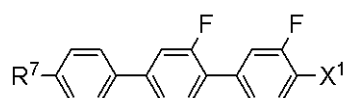
(3-62)



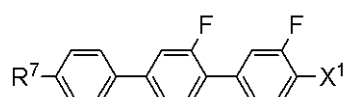
(3-63)



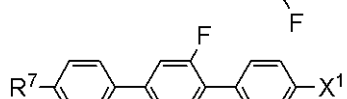
(3-64)



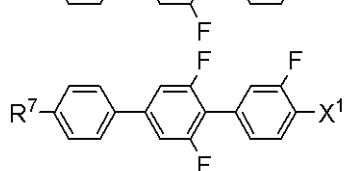
(3-65)



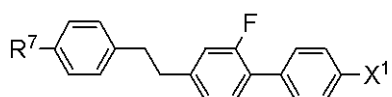
(3-66)



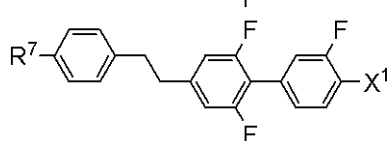
(3-67)



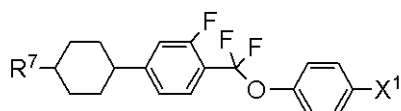
(3-68)



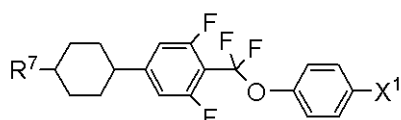
(3-69)



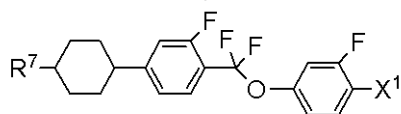
(3-70)



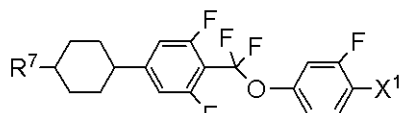
(3-71)



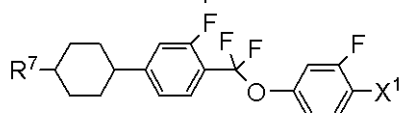
(3-72)



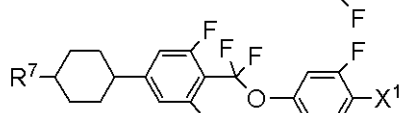
(3-73)



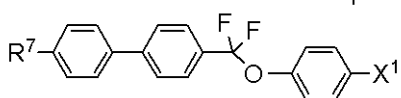
(3-74)



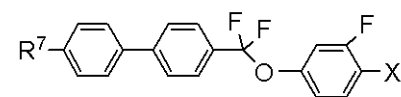
(3-75)



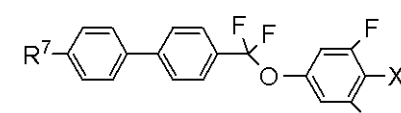
(3-76)



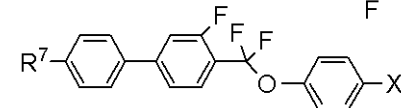
(3-77)



(3-78)



(3-79)



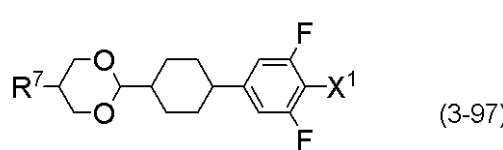
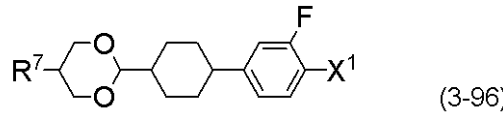
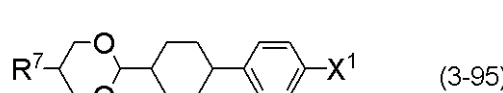
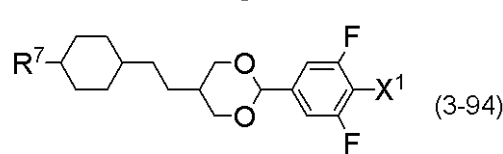
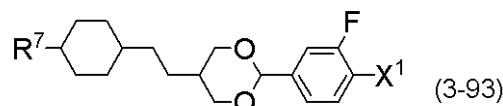
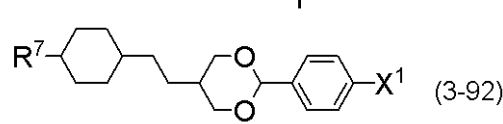
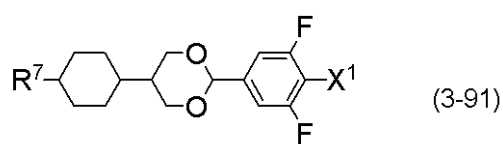
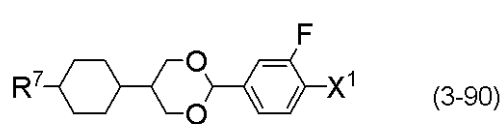
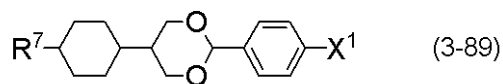
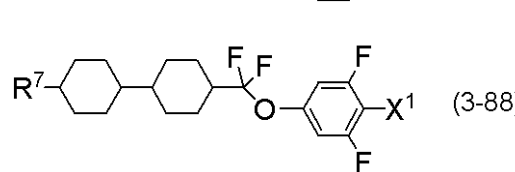
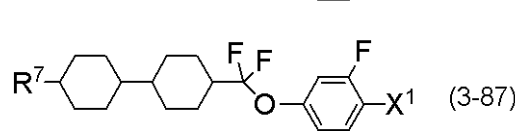
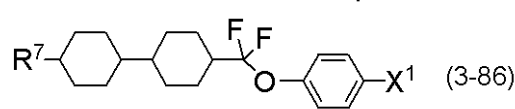
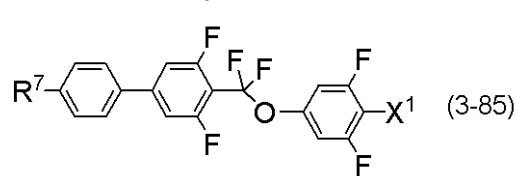
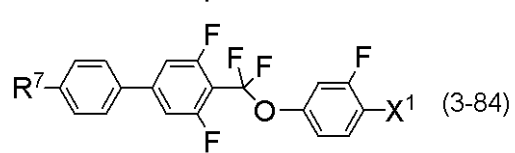
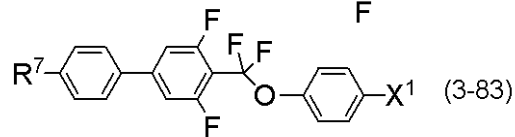
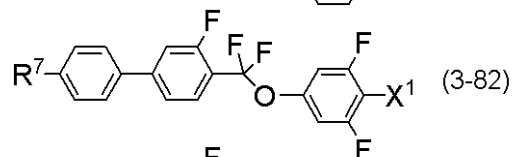
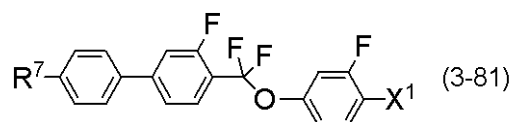
(3-80)

10

20

30

【 0 0 9 3 】

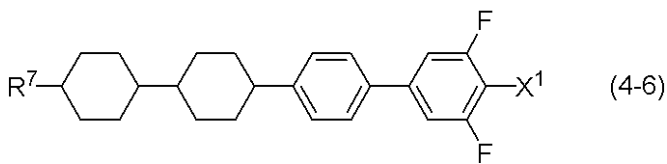
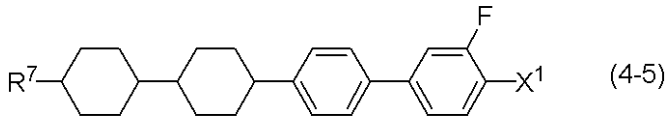
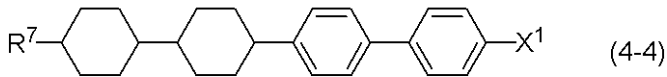
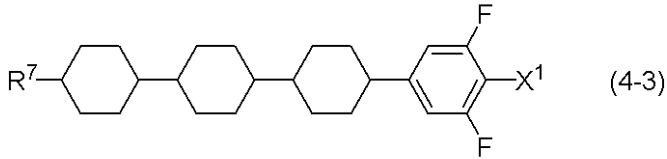
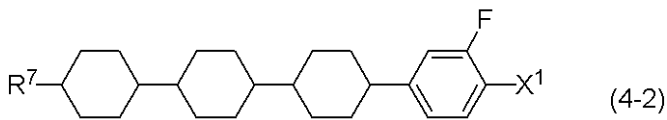
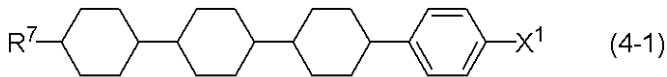


10

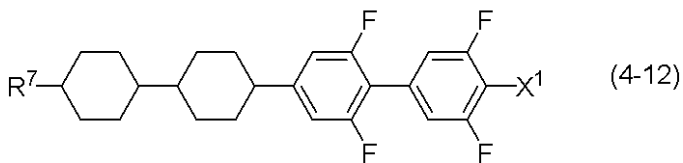
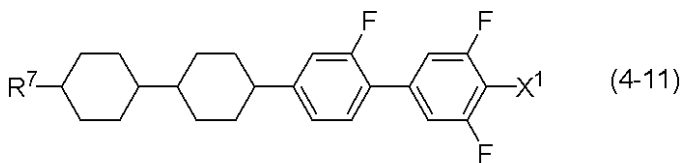
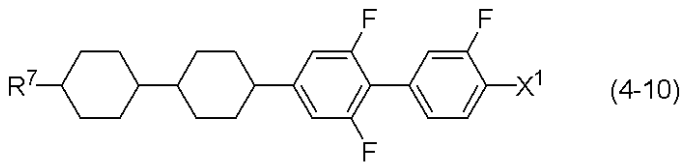
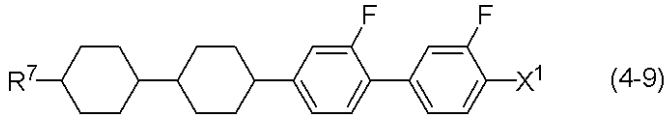
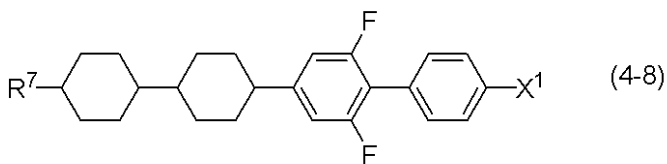
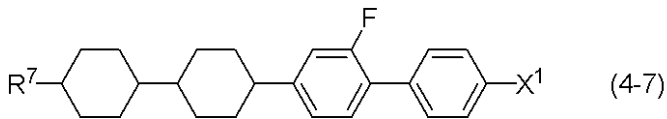
20

30

【 0 0 9 4 】



【 0 0 9 5 】



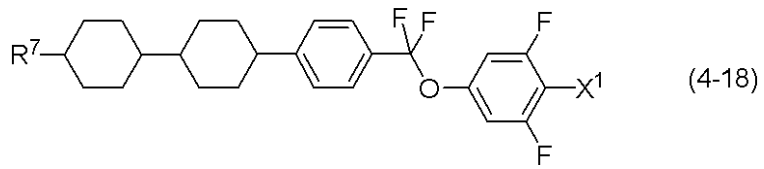
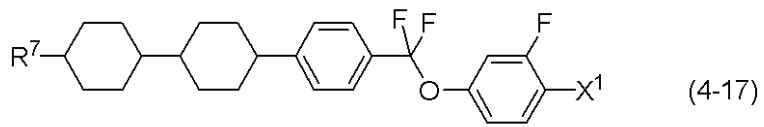
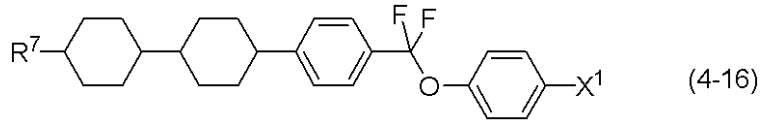
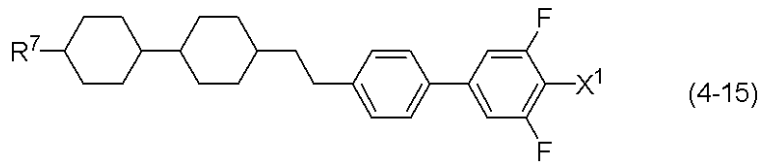
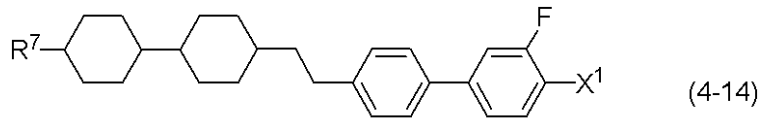
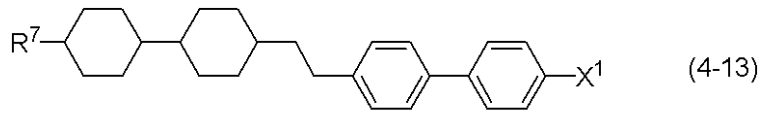
【 0 0 9 6 】

10

20

30

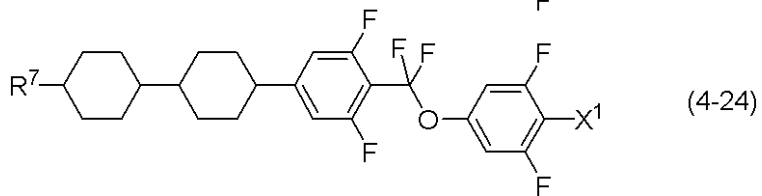
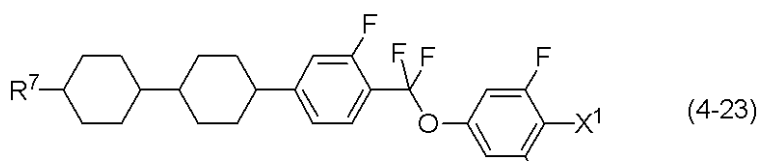
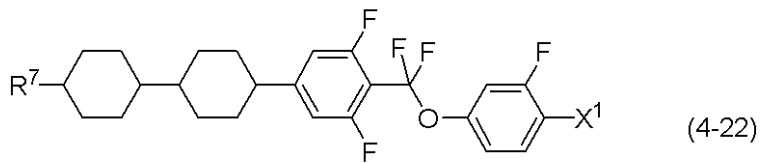
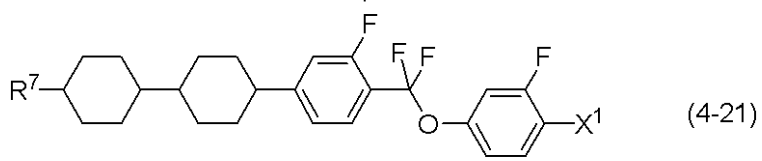
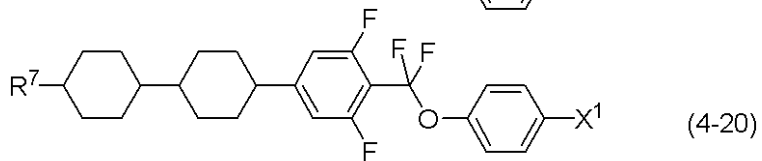
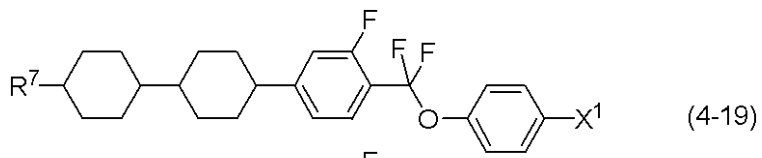
40



10

20

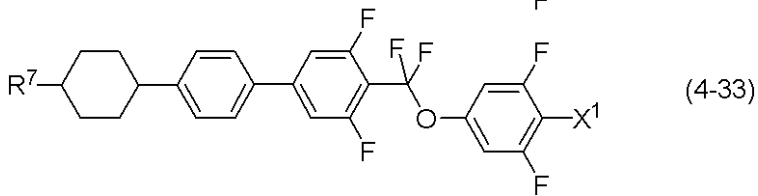
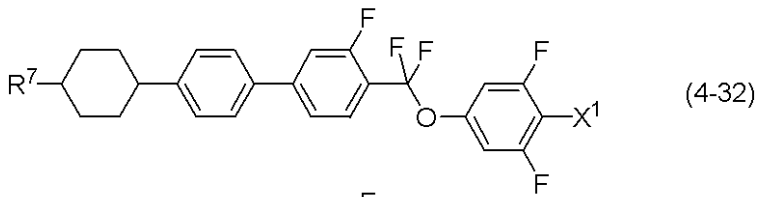
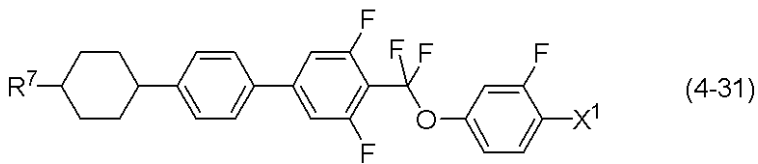
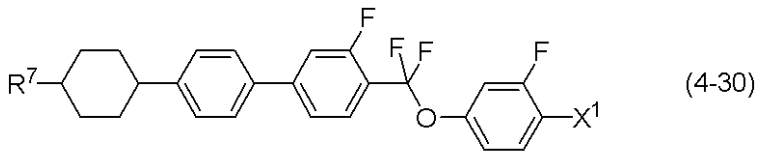
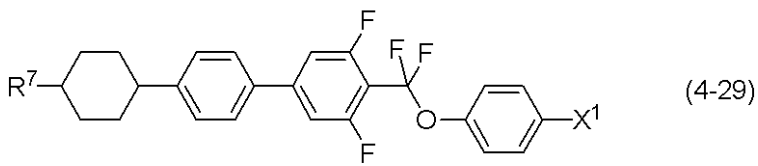
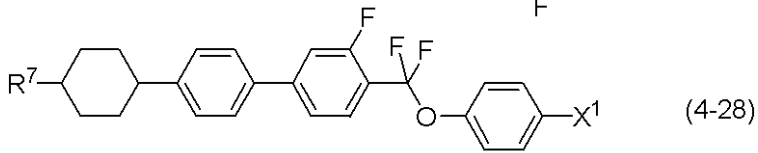
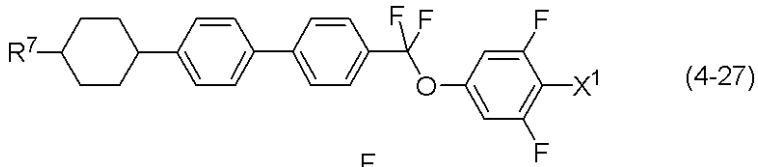
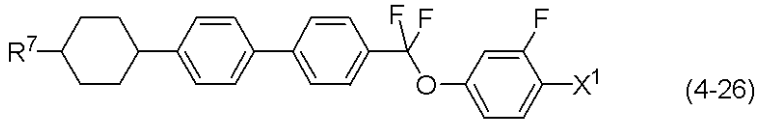
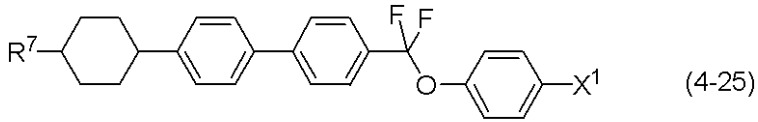
【 0 0 9 7 】



10

20

【 0 0 9 8 】



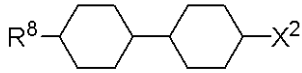
10

20

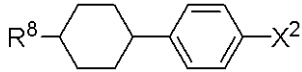
30

40

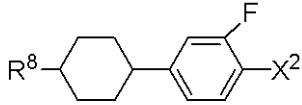
【 0 0 9 9 】



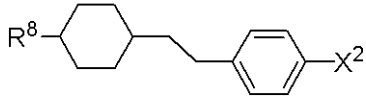
(5-1)



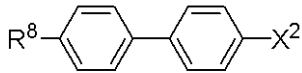
(5-2)



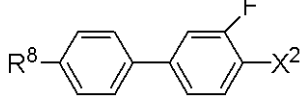
(5-3)



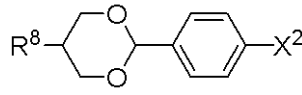
(5-4)



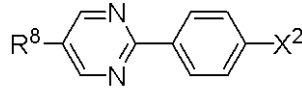
(5-5)



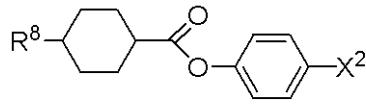
(5-6)



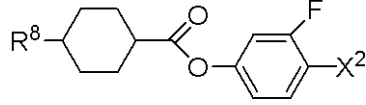
(5-7)



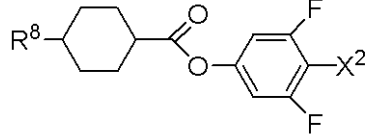
(5-8)



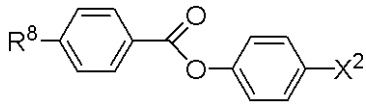
(5-9)



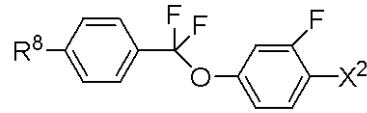
(5-10)



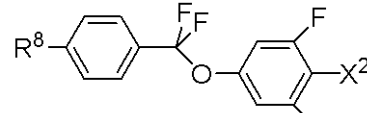
(5-11)



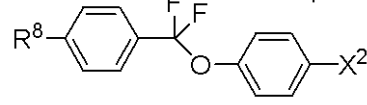
(5-12)



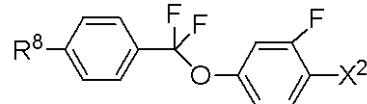
(5-13)



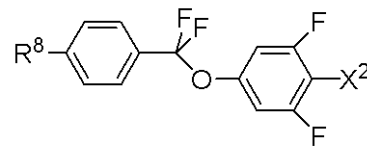
(5-14)



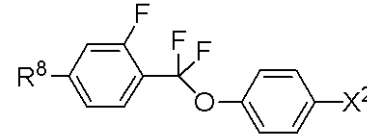
(5-15)



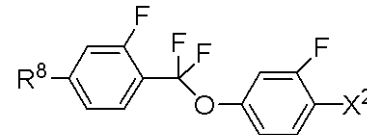
(5-16)



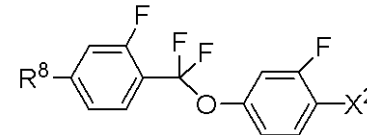
(5-17)



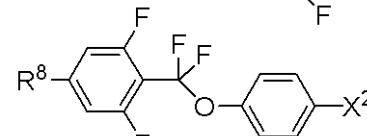
(5-18)



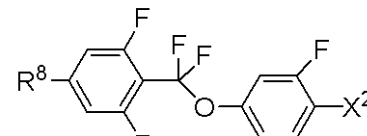
(5-19)



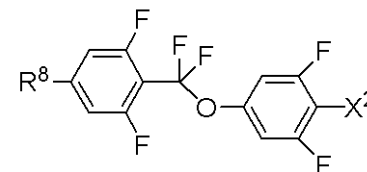
(5-20)



(5-21)



(5-22)



(5-23)

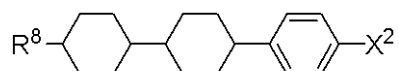
10

20

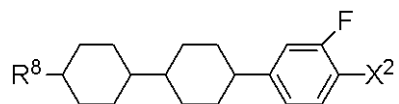
30

40

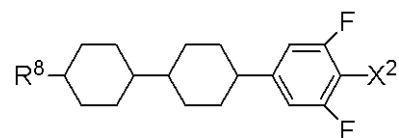
【 0 1 0 0 】



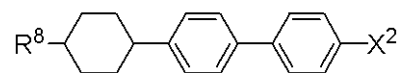
(5-24)



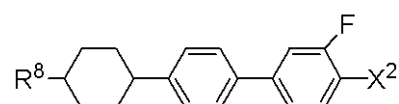
(5-25)



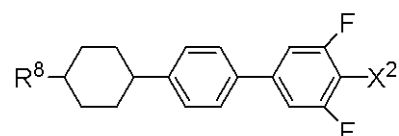
(5-26)



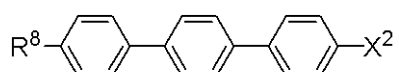
(5-27)



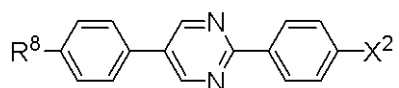
(5-28)



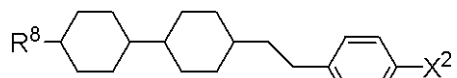
(5-29)



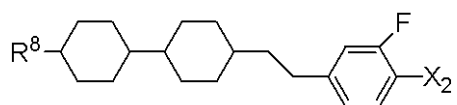
(5-30)



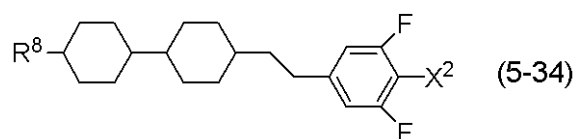
(5-31)



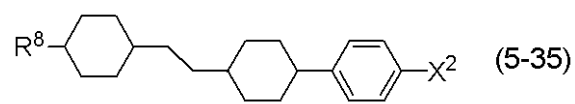
(5-32)



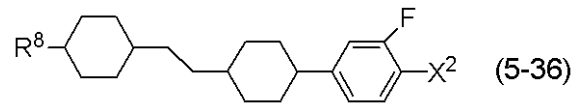
(5-33)



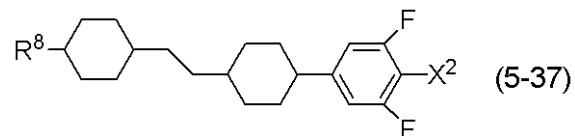
(5-34)



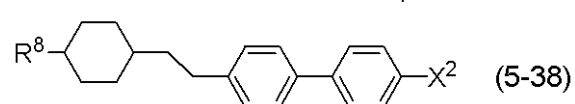
(5-35)



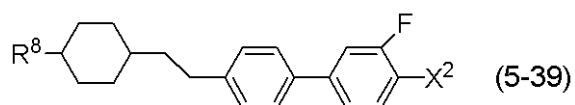
(5-36)



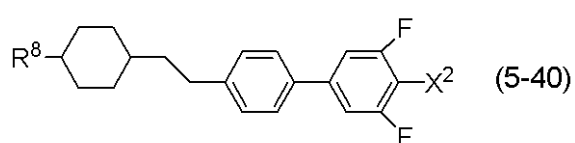
(5-37)



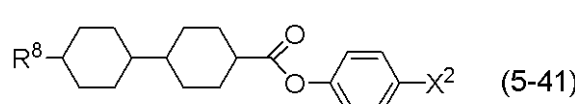
(5-38)



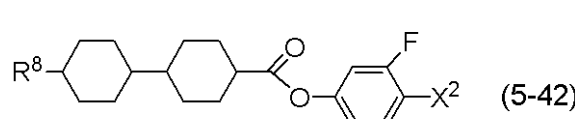
(5-39)



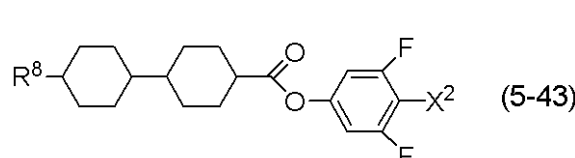
(5-40)



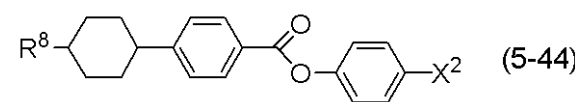
(5-41)



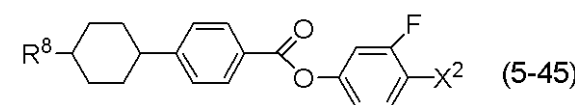
(5-42)



(5-43)



(5-44)



(5-45)

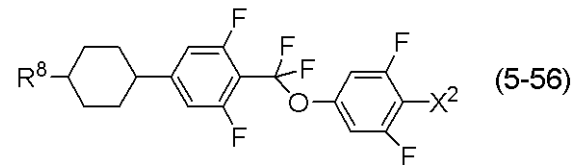
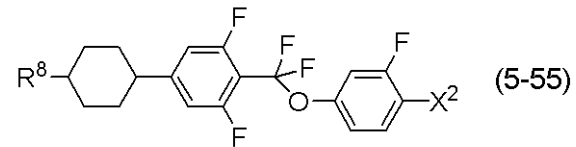
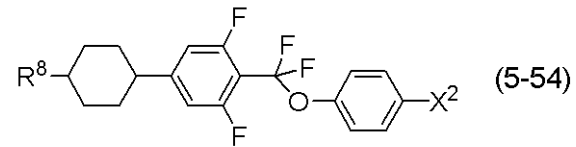
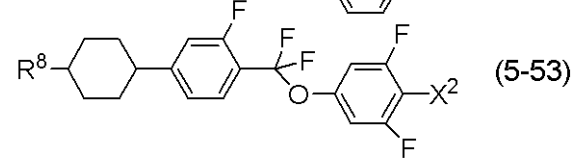
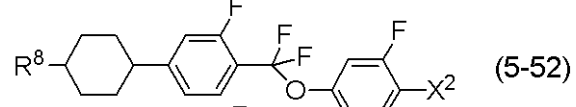
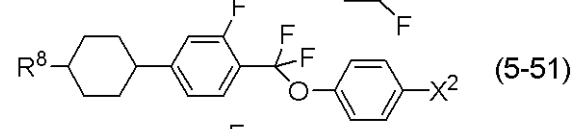
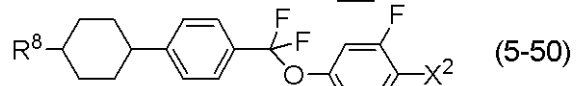
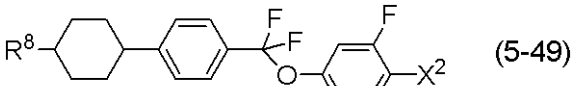
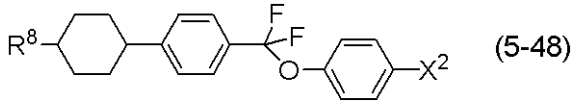
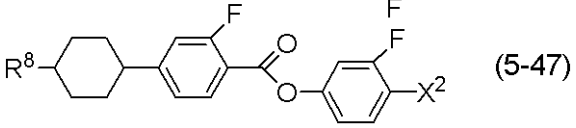
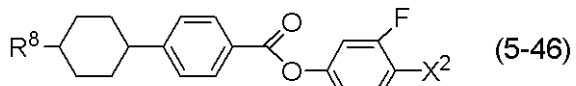
10

20

30

40

【 0 1 0 1 】



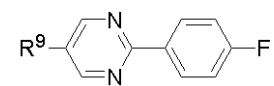
【 0 1 0 2 】

10

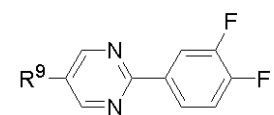
20

30

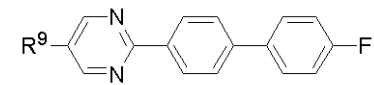
40



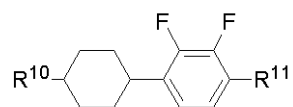
(6-1)



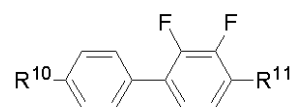
(6-2)



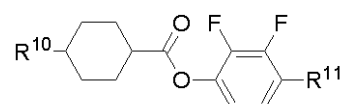
(6-3)



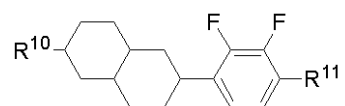
(7-1)



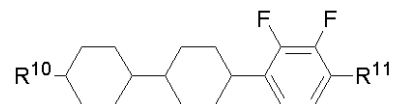
(7-2)



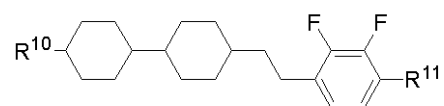
(7-3)



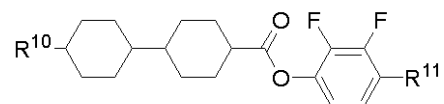
(7-4)



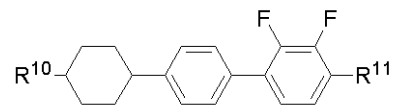
(8-1)



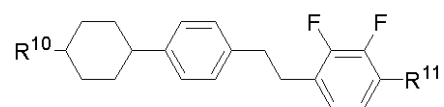
(8-2)



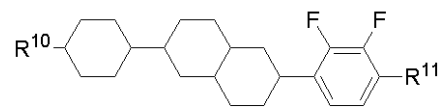
(8-3)



(8-4)

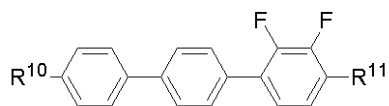


(8-5)

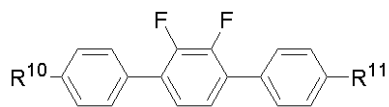


(8-6)

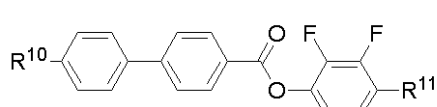
【 0 1 0 3 】



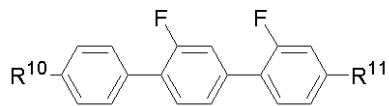
(9-1)



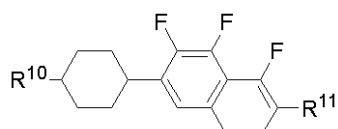
(9-2)



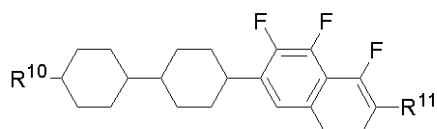
(9-3)



(9-4)



(10-1)



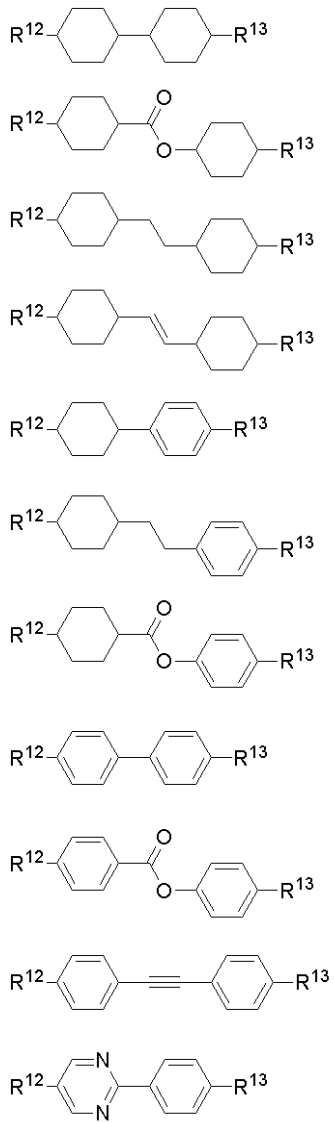
(11-1)

10

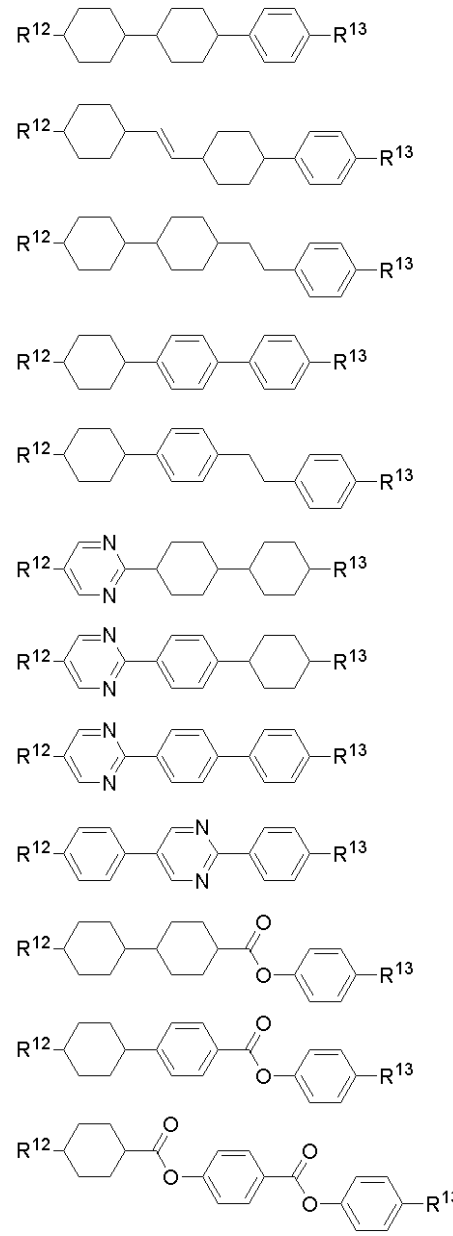
20

30

40



(12-1)
(12-2)
(12-3)
(12-4)
(12-5)
(12-6)
(12-7)
(12-8)
(12-9)
(12-10)
(12-11)



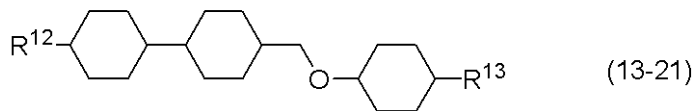
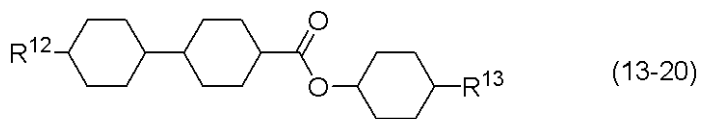
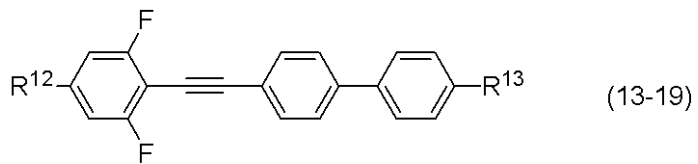
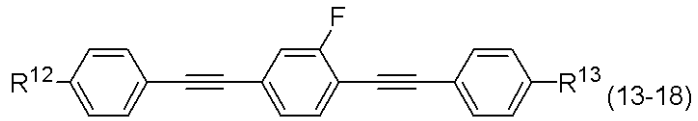
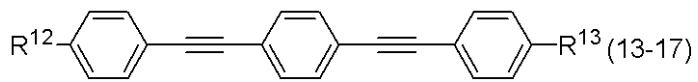
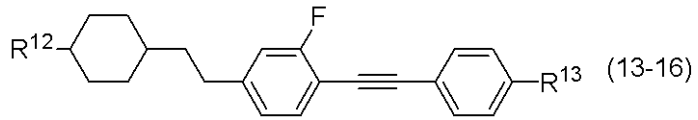
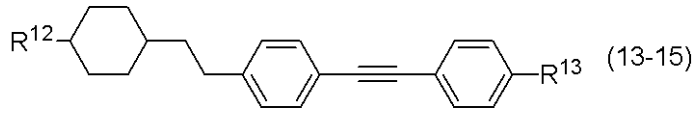
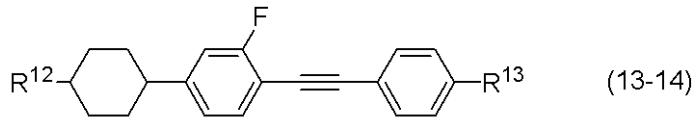
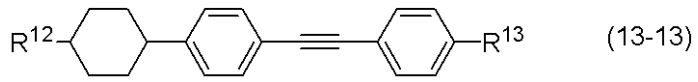
(13-1)
(13-2)
(13-3)
(13-4)
(13-5)
(13-6)
(13-7)
(13-8)
(13-9)
(13-10)
(13-11)
(13-12)

10

20

30

【 0 1 0 4 】

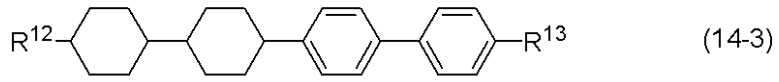
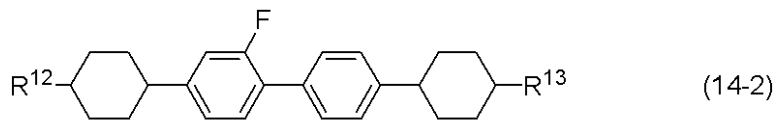
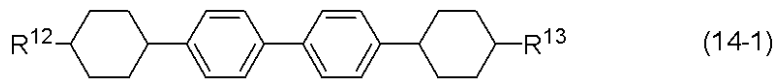


【 0 1 0 5 】

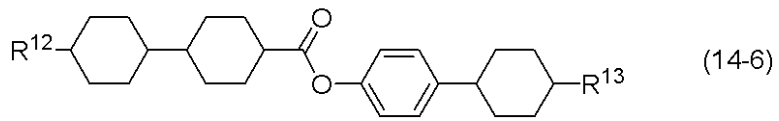
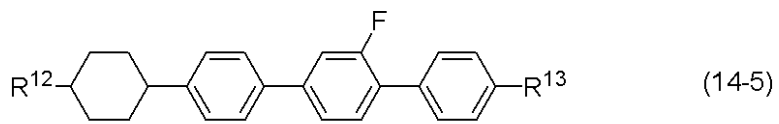
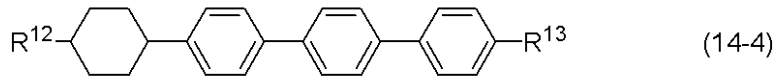
10

20

30

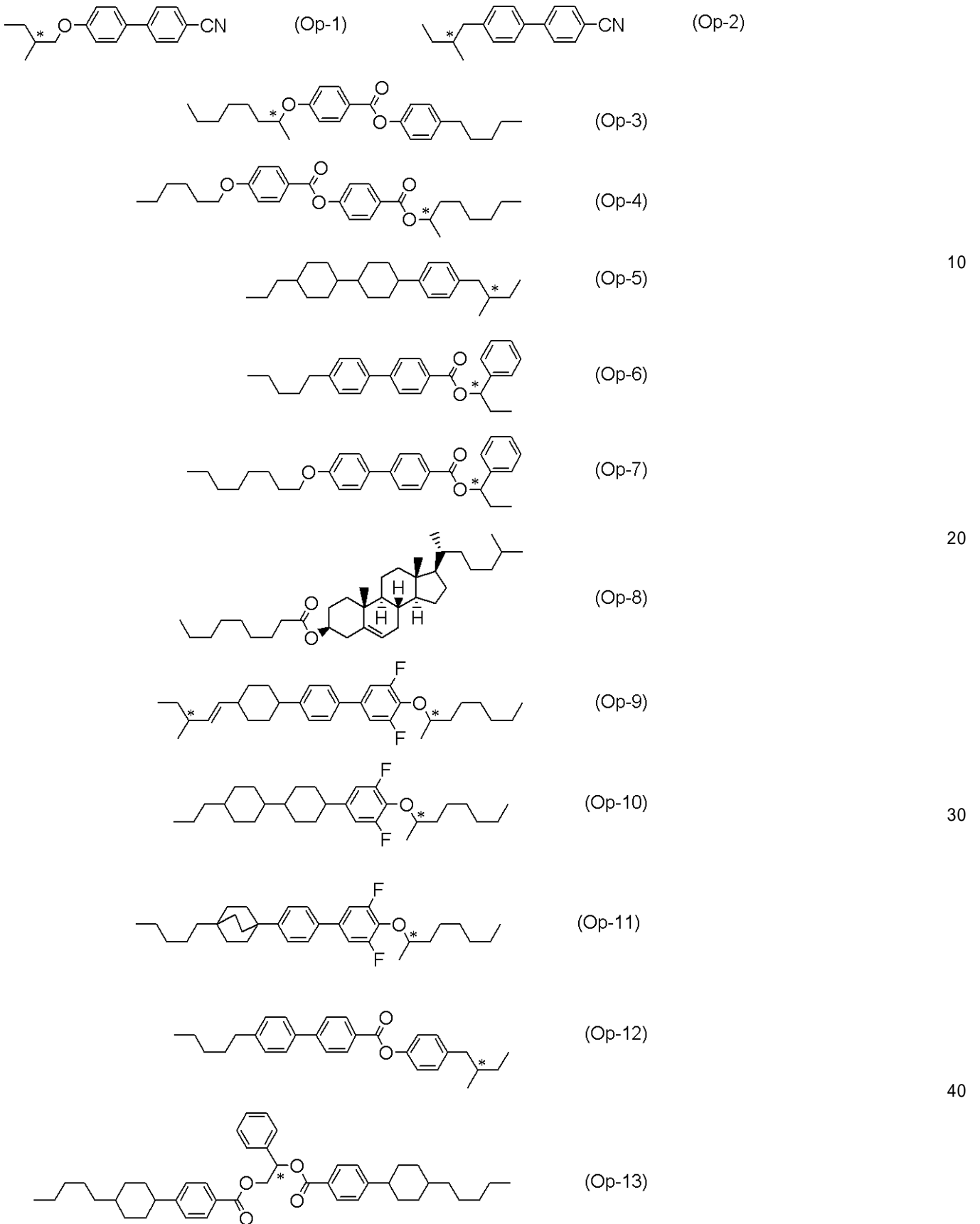


10



20

【 0 1 0 6 】



【 0 1 0 7 】

本発明の組成物は公知の方法によって調製される。例えば、成分である化合物を混合し、加熱によって互いに溶解させる。組成物に適当な添加物を加えて組成物の物性を調整してもよい。このような添加物は当業者によく知られている。メロシアン、スチリル、アゾ、アゾメチン、アゾキシ、キノフタロン、アントラキノン、テトラジンなどの化合物で

ある二色性色素を添加してGH素子用の組成物を調製してもよい。一方、液晶のらせん構造を誘起して必要なねじれ角を与える目的でキラルドーパントが添加される。キラルドーパントの例は上記の光学活性化合物(Op-1)~(Op-13)である。

【0108】

キラルドーパントを組成物に添加してねじれのピッチを調整する。TN素子およびTN-TFT素子用の好ましいピッチは40~200 μ mの範囲である。STN素子用の好ましいピッチは6~20 μ mの範囲である。BTN素子用の好ましいピッチは1.5~4 μ mの範囲である。PC素子用の組成物にはキラルドーパントを比較的多量に添加する。ピッチの温度依存性を調整する目的で少なくとも二つのキラルドーパントを添加してもよい。

10

【0109】

本発明の組成物は、PC、TN、STN、BTN、ECB、OCB、IPS、VAなどの素子に使用できる。これらの素子は駆動方式がPMであってもよいし、またはAMであってもよい。この組成物をマイクロカプセル化して作製したNCA P(nematic curvilinear aligned phase)素子や、組成物中に三次元の網目状高分子を形成させたPD(polymer dispersed)素子、例えばPN(polymer network)素子にも使用できる。

【実施例】

【0110】

実施例により本発明を詳細に説明する。本発明は下記の実施例によって限定されない。No.1などの化合物番号は、実施例5において表で示した化合物のそれと対応する。表において、1,4-シクロヘキシレンおよび1,3-ジオキサン-2,5-ジイルに関する立体配置はトランスである。-CH=CH-の結合基に関する立体配置はトランスである。実施例において記号の後にあるかっこ内の番号は好ましい化合物の番号に対応する。()の記号はその他の化合物を意味する。化合物の割合(百分率)は、組成物の全重量に基づいた重量百分率(重量%)である。最後に、組成物の特性値をまとめた。

20

【0111】

特性値の測定は下記の方法にしたがった。それらの多くは、日本電子機械工業会規格(Standard of Electric Industries Association of Japan)EIAJ・ED-2521Aに記載された方法、またはこれを修飾した方法である。

【0112】

ネマチック相の上限温度(NI;)：偏光顕微鏡を備えた融点測定装置のホットプレートに試料を置き、1 /分の速度で加熱した。試料の一部がネマチック相から等方性液体に変化したときの温度を測定した。ネマチック相の上限温度を「上限温度」と略すことがある。

30

【0113】

ネマチック相の下限温度(Tc;)：ネマチック相を有する試料を0、-10、-20、-30、および-40のフリーザー中に10日間保管したあと、液晶相を観察した。例えば、試料が-20ではネマチック相のままであり、-30では結晶またはスメクチック相に変化したとき、TCを-20と記載した。ネマチック相の下限温度を「下限温度」と略すことがある。

40

【0114】

光学異方性(屈折率異方性; n ; 25で測定)：測定は、波長589nmの光を用い、接眼鏡に偏光板を取り付けたアッペ屈折計により行なった。主プリズムの表面を一方方向にラビングしたあと、試料を主プリズムに滴下した。屈折率 n は偏光の方向がラビングの方向と平行であるときに測定した。屈折率 n は偏光の方向がラビングの方向と垂直であるときに測定した。光学異方性の値は、 $n = n - n$ 、の式から計算した。試料が組成物のときはこの方法によって光学異方性を測定した。試料が化合物のときは、化合物を適切な組成物に混合したあと光学異方性を測定した。化合物の光学異方性は外挿値である。

【0115】

50

粘度 (; 20 と - 10 で測定 ; m P a · s) : 測定には E 型粘度計を用いた。20 で測定した値を (20)、- 10 で測定した値を (- 10) と表記した。

【 0 1 1 6 】

誘電率異方性 (; 25 で測定)

の値が正の組成物の場合 : 2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 9 μ m であり、そしてツイスト角が 80 度の TN 素子に試料を入れた。この TN 素子に 10 ボルトを印加して、液晶分子の長軸方向における誘電率 () を測定した。0.5 ボルトを印加して、液晶分子の短軸方向における誘電率 () を測定した。誘電率異方性の値は、
= - 、の式から計算した。正の誘電率異方性を有する組成物をこの方法によって測定した。試料が化合物のときは、化合物を適切な組成物に混合したあと誘電率異方性を測定した。化合物の誘電率異方性は外挿値である。

10

【 0 1 1 7 】

の値が負の組成物の場合 : 2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が 20 μ m である VA 素子に試料を入れた。この VA 素子に 0.5 ボルトを印加して、液晶分子の長軸方向における誘電率 () を測定した。2 枚のガラス基板の間隔が 9 μ m である TN 素子に試料を入れた。この TN 素子に 0.5 ボルトを印加して、液晶分子の短軸方向における誘電率 () を測定した。誘電率異方性の値は、
= - の式から計算した。負の誘電率異方性を有する組成物をこの方法によって測定した。試料が化合物のときは、化合物を適切な組成物に混合したあと誘電率異方性を測定した。化合物の誘電率異方性は外挿値である。

20

【 0 1 1 8 】

しきい値電圧 (V t h ; 25 で測定 ; V) : 2 枚のガラス基板の間隔 (セルギャップ) が (0.5 / n) μ m であり、ツイスト角が 80 度であるノーマリーホワイトモード (normally white mode) の液晶表示素子に試料を入れた。 n は上記の方法で測定した光学異方性の値である。この素子に周波数が 32 Hz である矩形波を印加した。印加電圧を上昇させ、TN 素子を通過する光の透過率が 90 % になったときの電圧の値を測定した。

【 0 1 1 9 】

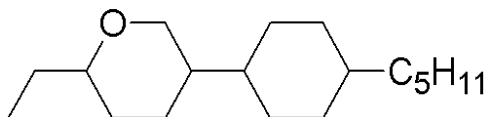
らせんピッチ (20 で測定 ; μ m) : らせんピッチの測定には、カノのくさび型セル法を用いた。カノのくさび型セルに試料を注入し、セルから観察されるディスクリネーションラインの間隔 (a ; 単位は μ m) を測定した。らせんピッチ (P) は、式 $P = 2 \cdot a \cdot \tan$ から算出した。は、くさび型セルにおける 2 枚のガラス板の間の角度である。

30

【 0 1 2 0 】

実施例 1

2 - エチル - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 1 - 1 - 1) の合成



40

【 0 1 2 1 】

第一工程

(4 - ペンチルシクロヘキシル) アセトアルデヒド (30 . 1 g) をジエチルエーテ (40 m l) に溶解し、シクロヘキシルアミン (15 . 2 g) と炭酸カリウム (12 g) を加え、室温で一晩攪拌した。この懸濁液をセライトろ過し、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた黄色油状のシクロヘキシル - [2 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) エチリデン] アミン (40 . 6 g) を精製することなく第二工程に用いた。

【 0 1 2 2 】

第二工程

第一工程で得られた粗製のシクロヘキシル - [2 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) エ

50

チリデン]アミン(40.6g)をアクリル酸エチル(40ml)に溶解し、ヒドロキノ
ン(0.6g)を加え、105℃で10時間加熱還流した。室温まで冷却し、THF(5
00ml)を加え、飽和シュウ酸水溶液(300ml)を徐々に加え、ジエチルエーテル
で抽出した。有機層を水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮し
た。得られた褐色の残渣(44.93g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精
製し、黄色油状の5-オキサ-4-(4-ペンチルシクロヘキシル)ペンタン酸エチル(27.4g)を得た。

【0123】

第三工程

第二工程で得られた5-オキサ-4-(4-ペンチルシクロヘキシル)ペンタン酸エチ
ル(27.4g)をイソプロパノール(200ml)に溶解し、シアノ水素化ホウ素ナト
リウム(6.5g)を加え、HCl(2N)で常にpHが約3になるよう調整しながら室
温で3時間撹拌した。反応液に水(100ml)を加え、トルエンで抽出した。有機層を
水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた橙色の残渣(23.3g)をシリカゲルカラム
クロマトグラフィーにて精製し、淡黄色油状の5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テト
ラヒドロピラン-2-オン(14.0g)を得た。

10

【0124】

第四工程

トリメチルシリルアセチレン(16.8ml)をTHF(300ml)に溶解した後、
-70℃でn-ブチルリチウム(1.5M、ヘキサン溶液、74.2ml)を滴下し、同
温度で1時間撹拌した。この溶液に第三工程で得られた5-(4-ペンチルシクロヘキシル)
テトラヒドロピラン-2-オン(14.0g)を-70℃で滴下し、さらに1時間同
温度で撹拌し、その後徐々に室温まで昇温した。反応物を飽和塩化アンモニウム水溶液3
00mlに注ぎ、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した
。得られた褐色の残渣(20.2g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し
、褐色固体5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-2-トリメチルシラニルエチニルテト
ラヒドロピラン-2-オール(13.9g)を得た。

20

【0125】

第五工程

第四工程で得られた5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-2-トリメチルシラニルエ
チニルテトラヒドロピラン-2-オール(13.9g)をジクロロメタン(150ml)
とアセトニトリル(30ml)に溶解し、-50℃でトリエチルシラン(11.8ml)
を滴下し、続けて3フッ化ホウ素-ジエチルエーテル錯体(7ml)を滴下した。ゆっく
り0℃に昇温した後、氷水300ml中に注ぎ、n-ヘプタンで抽出した。有機層を水で
洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた褐色の残渣(11.0g)をシリカゲルカラムクロ
マトグラフィーにて精製し、黄色油状の2-エチニル-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)
テトラヒドロピラン(8.9g)を得た。

30

【0126】

第六工程

第五工程で得られた2-エチニル-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒド
ロピラン(2.9g)をイソプロパノール(50ml)に溶解し、Pd-C触媒0.15g
を加えた。真空ポンプで反応容器を減圧にした後、水素を常圧で導入し、常温で一晩撹
拌した。反応液をろ過し、触媒を取り除いた後、減圧下に濃縮した。得られた無色の残渣
(2.7g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、無色油状の2-エチル-
5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(2.4g)を得た。このもの
をさらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な2-エチル-5-(4-ペンチルシ
クロヘキシル)テトラヒドロピラン(0.5g)をえた。

40

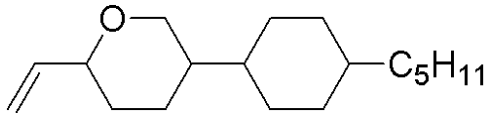
【0127】

実施例2

2-ビニル-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1

50

- 1 - 1 - 4) の合成



【 0 1 2 8 】

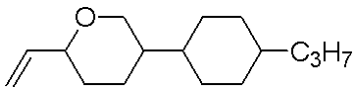
実施例 1 の第五工程で得られた 2 - エチニル - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (2 . 7 g) を n - ヘプタン (3 0 m l) に溶解し、キノリン (0 . 4 m l) と Lindlar 触媒 0 . 0 4 g を加えた。真空ポンプで反応容器を減圧にした後、水素を常圧で導入し、常温で 9 0 分撹拌した。反応液をろ過し、触媒を取り除いた後、減圧下に濃縮した。得られた淡黄色の残渣 (2 . 5 g) をシリカゲルカラムクロマトグラフィにて精製し、無色油状の 2 - ビニル - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (2 . 2 g) を得た。このものをさらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な 2 - ビニル - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (1 . 2 g) を得た。

10

【 0 1 2 9 】

実施例 3

2 - ビニル - 5 - (4 - プロピルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 1 - 1 - 5) の合成



20

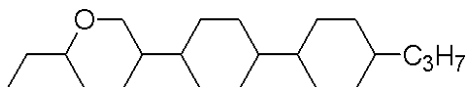
【 0 1 3 0 】

(4 - ペンチルシクロヘキシル) アセトアルデヒドに替えて (4 - プロピルシクロヘキシル) アセトアルデヒドを用い、実施例 2 と同様に合成を行うことにより 2 - ビニル - 5 - (4 - プロピルシクロヘキシル) テトラヒドロピランを合成した。

【 0 1 3 1 】

実施例 4

2 - エチル - 5 - (4 ' - プロピル - ビシクロヘキシル - 4 - イル) テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 4 - 1 - 2) の合成



30

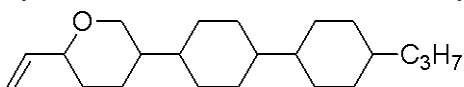
【 0 1 3 2 】

(4 - ペンチルシクロヘキシル) アセトアルデヒドに替えて (4 ' - プロピルビシクロヘキシル - 4 - イル) アセトアルデヒドを用い、実施例 1 と同様に合成を行うことにより 2 - エチル - 5 - (4 ' - プロピルビシクロヘキシル - 4 - イル) テトラヒドロピランを合成した。

【 0 1 3 3 】

実施例 5

5 - (4 ' - プロピルビシクロヘキシル - 4 - イル) - 2 - ビニル - テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 4 - 1 - 6) の合成



40

【 0 1 3 4 】

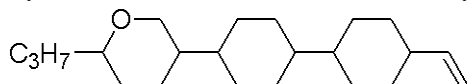
(4 - ペンチルシクロヘキシル) アセトアルデヒドに替えて (4 ' - プロピルビシクロヘキシル - 4 - イル) アセトアルデヒドを用い、実施例 2 と同様に合成を行うことにより 5 - (4 ' - プロピルビシクロヘキシル - 4 - イル) - 2 - ビニル - テトラヒドロピランを合成した。

【 0 1 3 5 】

50

実施例 6

2 - プロピル - 5 - (4 ' - ビニルピシクロヘキシル - 4 - イル) - テトラヒドロピラン
(化合物 No . 1 - 4 - 1 - 4) の合成



【 0 1 3 6 】

第一工程

塩化メトキシメチルトリフェニルホスホニウム (17 . 9 g) を T H F (1 5 0 m l) に懸濁し、 - 2 0 でカリウム - t - ブトキシド (5 . 8 g) の T H F (1 5 0 m l) 溶液を滴下した。 - 2 0 で 3 0 分 攪拌した後、同温度で 4 ' - ビニルピシクロヘキシル - 4 - カルボアルデヒド (9 . 0 g) の T H F 1 0 0 m l 溶液を滴下し、同温度で 1 時間攪拌した。室温まで昇温し、反応液に水 (3 0 0 m l) を加え、トルエンで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に約 3 0 0 m l まで濃縮し、n - ヘプタン (1 0 0 0 m l) に強く攪拌しながら投入し、減圧ろ過した。ろ液を減圧下に濃縮し、得られた淡黄色の残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色油状の 4 - (2 - メトキシビニル) - 4 ' - ビニルピシクロヘキシル (8 . 9 g) を得た。

10

【 0 1 3 7 】

第二工程

第一工程で得られた 4 - (2 - メトキシビニル) - 4 ' - ビニルピシクロヘキシル (8 . 9 g) をアセトン (1 0 0 m l) に溶解し、H C l (2 N) 6 m l を加え室温で 2 時間攪拌した。反応液に水 (1 0 0 m l) を加え、トルエンで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮し、得られた淡黄色の残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色油状の (4 ' - ビニル - ピシクロヘキシル - 4 - イル) - アセトアルデヒド (8 . 2 g) を得た。

20

【 0 1 3 8 】

第三工程

第一工程で得られた (4 ' - ビニル - ピシクロヘキシル - 4 - イル) - アセトアルデヒド (8 . 2 g) を T H F (1 0 0 m l) に溶解し、シクロヘキシルアミン (3 . 5 g) と炭酸カリウム (3 g) を加え、室温で一晩攪拌した。この懸濁液をセライトろ過し、ろ液を減圧下で濃縮した。得られた黄色油状のシクロヘキシル - [2 - (4 ' - ビニルシクロヘキシル - 4 - イル) エチリデン] アミン (1 1 . 3 g) を精製することなく第四工程に用いた。

30

【 0 1 3 9 】

第四工程

第一工程で得られた粗製のシクロヘキシル - [2 - (4 ' - ビニルシクロヘキシル - 4 - イル) エチリデン] アミン (1 1 . 3 g) をアクリル酸エチル (2 0 m l) に溶解し、ヒドロキノン (0 . 2 g) を加え、1 1 0 で 1 5 時間加熱還流した。室温まで冷却し、T H F (5 0 m l) を加え、飽和シュウ酸水溶液 (1 0 0 m l) を徐々に加え、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を飽和食塩水で洗浄し、無水硫酸マグネシウムで乾燥した後、減圧下に濃縮した。得られた黄色の残渣 (1 1 . 9 g) をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、無色油状の 5 - オキサ - 4 - (4 ' - ビニルピシクロヘキシル - 4 - イル) ペンタン酸エチル (7 . 8 g) を得た。

40

【 0 1 4 0 】

第五工程

第四工程で得られた 5 - オキサ - 4 - (4 ' - ビニルピシクロヘキシル - 4 - イル) ペンタン酸エチル (7 . 8 g) イソプロパノール (4 0 m l) に溶解し、シアノ水素化ホウ素ナトリウム (1 . 2 g) を加え、H C l (2 N) で常に p h が約 3 になるよう調整しながら室温で 3 時間攪拌した。反応液に水 (1 0 0 m l) を加え、トルエンで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた無色の残渣 (7 . 3 g) をシリカゲルカ

50

ラムクロマトグラフィーにて精製し、無色油状の5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)テトラヒドロピラン-2-オン(6.0g)を得た。

【0141】

第六工程

細かく切り分けた金属リチウム(0.85g)をジエチルエーテル(50ml)にくわえ、室温で1-ブロモプロパン(7.4g)のTHF(30ml)溶液を反応液が緩やかに還流するようゆっくり滴下し、同温度で1時間攪拌したのち、室温で静置し固体を沈殿させ、上澄みを次の反応に用いた。別の反応装置に第五工程で得られた5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)テトラヒドロピラン-2-オン(6.0g)のTHF溶液を投入し、-70に冷却し、先ほど得られた上澄みを滴下、さらに1時間同温度で攪拌し、その後徐々に室温まで昇温した。反応物を飽和塩化アンモニウム水溶液100mlに注ぎ、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた白色の固体(5.4g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色固体2-プロピル-5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)-2-テトラヒドロピラン-2-オール(1.8g)を得た。

【0142】

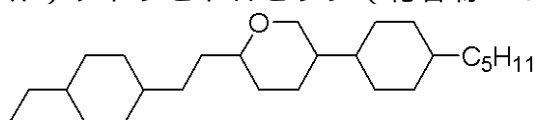
第七工程

第六工程で得られた2-プロピル-5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)-2-テトラヒドロピラン-2-オール(1.8g)をジクロロメタン(50ml)とアセトニトリル(10ml)に溶解し、-50でトリエチルシラン(1.5ml)を滴下し、続けて3フッ化ホウ素-ジエチルエーテル錯体(0.9ml)を滴下した。ゆっくり0に昇温した後、氷水50ml中に注ぎ、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた白色固体(1.8g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色固体の2-プロピル-5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)-テトラヒドロピラン(1.4g)を得た。このものをさらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な2-プロピル-5-(4'-ビニルシクロヘキシル-4-イル)-テトラヒドロピラン(0.6g)を得た。

【0143】

実施例7

2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)エチル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-5-1-10)の合成



第一工程

1-エチル-4-エチニルシクロヘキサン(3.5g)をTHF(100ml)に溶解した後、-70でn-ブチルリチウム(1.5M、ヘキサン溶液、16.0ml)を滴下し、同温度で1時間攪拌した。この溶液に実施例1の第三工程で得られた5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン-2-オン(5.4g)を-70で滴下し、さらに1時間同温度で攪拌し、その後徐々に室温まで昇温した。反応物を飽和塩化アンモニウム水溶液100mlに注ぎ、ジエチルエーテルで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた褐色の残渣(7.9g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、褐色固体2-(4-エチルシクロヘキシルエチニル)-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン-2-オール(7.4g)を得た。

【0144】

第二工程

第一工程で得られた2-(4-エチルシクロヘキシルエチニル)-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン-2-オール(7.4g)をジクロロメタン(50ml)とアセトニトリル(10ml)に溶解し、-50でトリエチルシラン(5.4ml)を滴下し、続けて3フッ化ホウ素-ジエチルエーテル錯体(3.2ml)を滴下した

。ゆっくり0 に昇温した後、氷水50ml中に注ぎ、n-ヘプタンで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた褐色の残渣(7.2g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄色油状の2-(4-エチルシクロヘキシルエチニル)-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン(6.6g)を得た。

【0145】

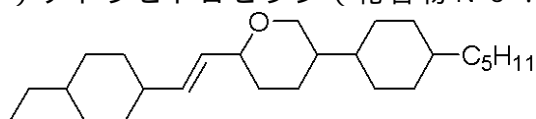
第三工程

第二工程で得られた2-(4-エチルシクロヘキシルエチニル)-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン(3.0g)をn-ヘプタン(30ml)に溶解し、Pd-C触媒0.15gを加えた。真空ポンプで反応容器を減圧にした後、水素を常圧で導入し、常温で一晩攪拌した。反応液をろ過し、触媒を取り除いた後、減圧下に濃縮した。得られた淡黄色の残渣(2.8g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、無色固体の2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)-エチル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン(2.5g)を得た。このものをさらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)エチル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(1.5g)を得た。

【0146】

実施例8

2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)ビニル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-5-1-19)の合成



【0147】

実施例7の第二工程で得られた2-(4-エチルシクロヘキシルエチニル)-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)-テトラヒドロピラン(3.6g)をジエチルエーテル(10ml)およびエタノール(10ml)に溶解させた。Dewar冷却器にドライアイスメタノールを入れ、系内に乾燥アンモニアガスを導入し、液体アンモニア約100mlを溜め、リチウム0.7gを少しずつ加えた。3時間攪拌後、塩化アンモニウム50gを加え、Dewar冷却器を取り外し

、チソッ気流下アンモニアを系内から除去した。残渣に飽和塩化アンモニウム水溶液100mlを加え、ジクロロメタンで抽出した。有機層を水で洗浄し、減圧下に濃縮した。得られた黄色の残渣(3.3g)をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、無色固体の2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)ビニル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(2.9g)を得た。このものをさらに再結晶を繰り返すことにより精製し、純粋な2-[2-(4-エチルシクロヘキシル)ビニル]-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(1.8g)を得た。

【0148】

実施例9

実施例1~4、さらに記載した合成法をもとに、下記の化合物No.1-1-1-1~1-6-3-27を合成する。実施例1~4で得られた化合物(No.1-1-1-1、No.1-1-1-4、No.1-5-1-10、No.1-5-1-19)もリストアップした。

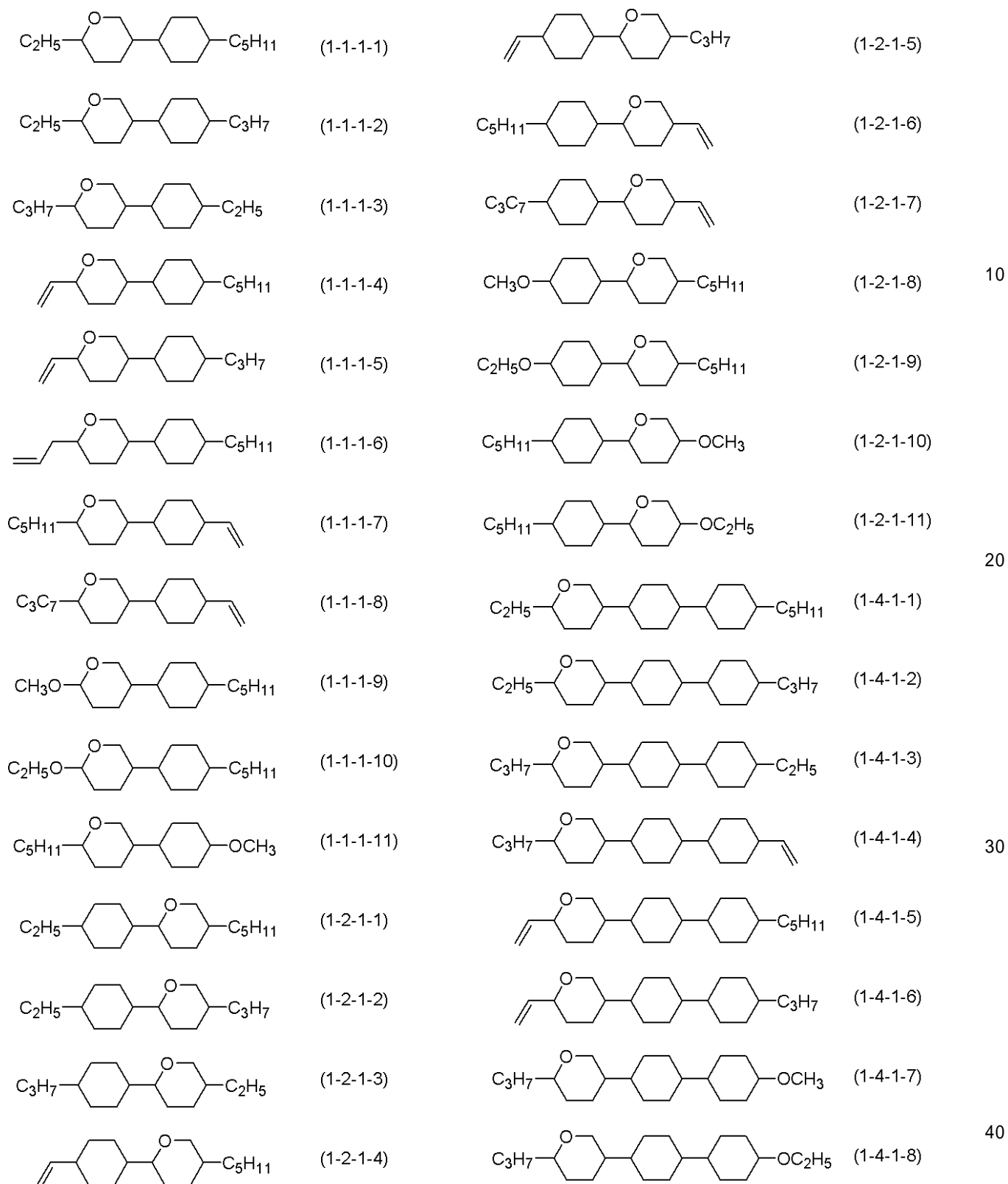
【0149】

10

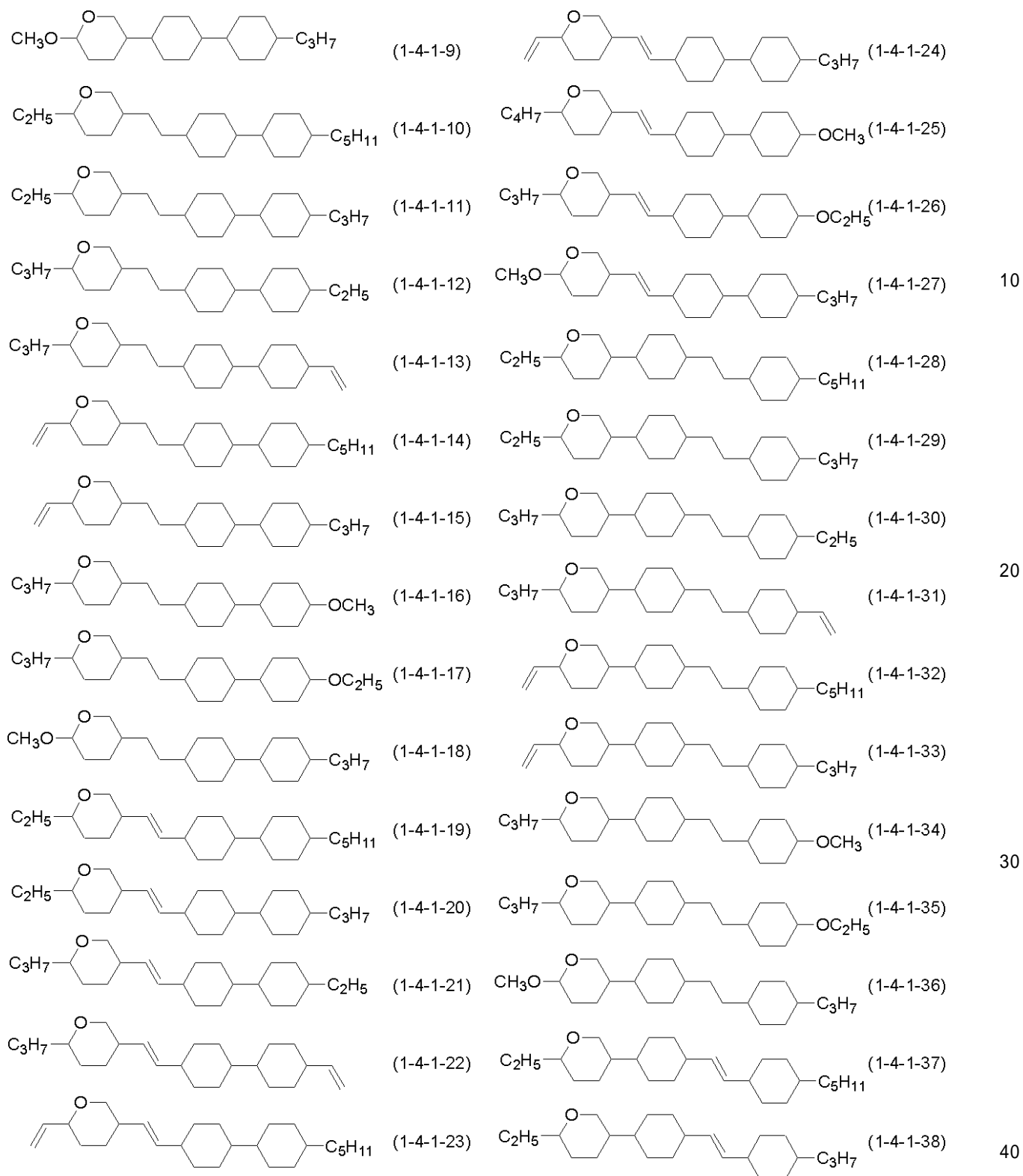
20

30

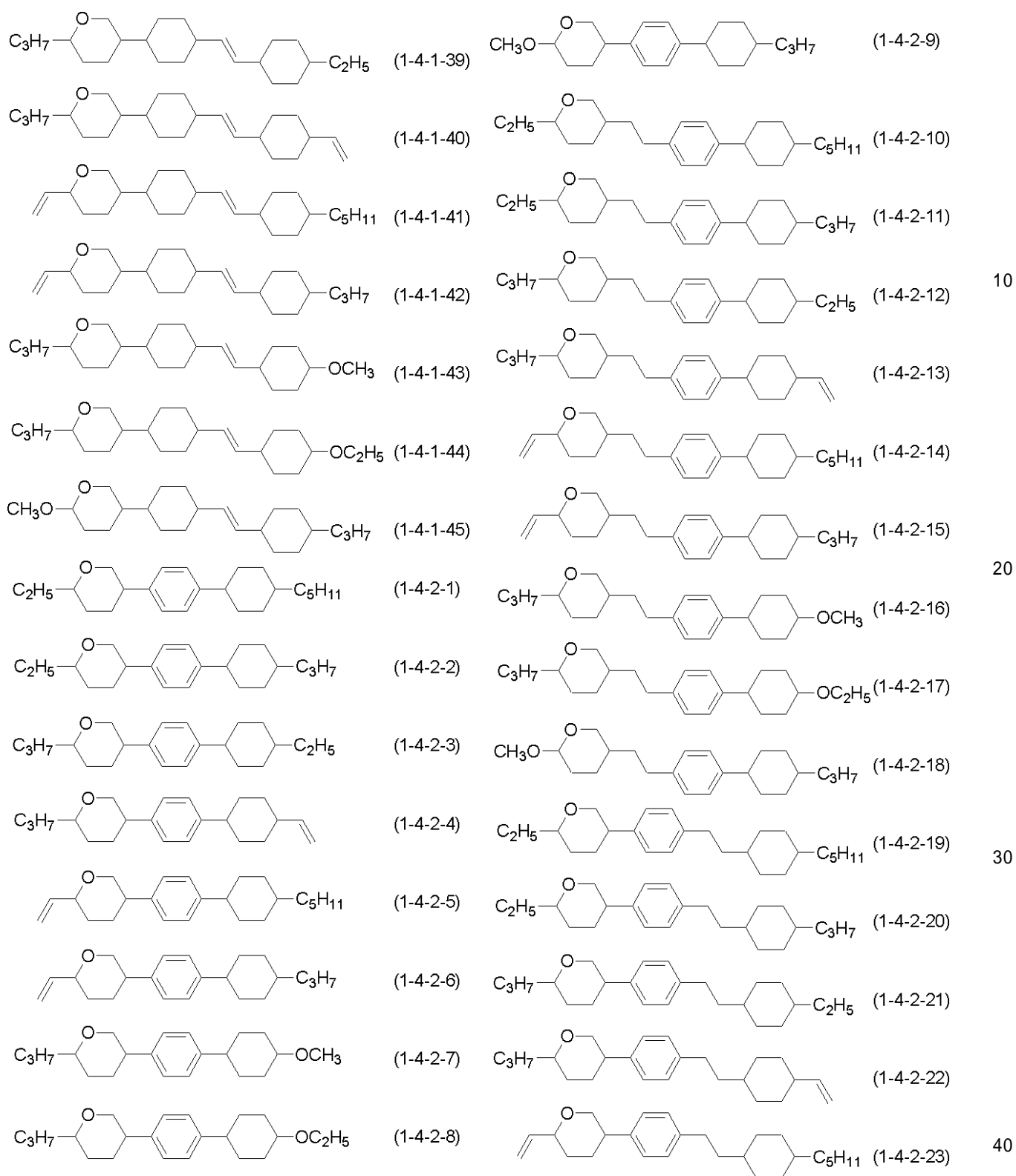
40



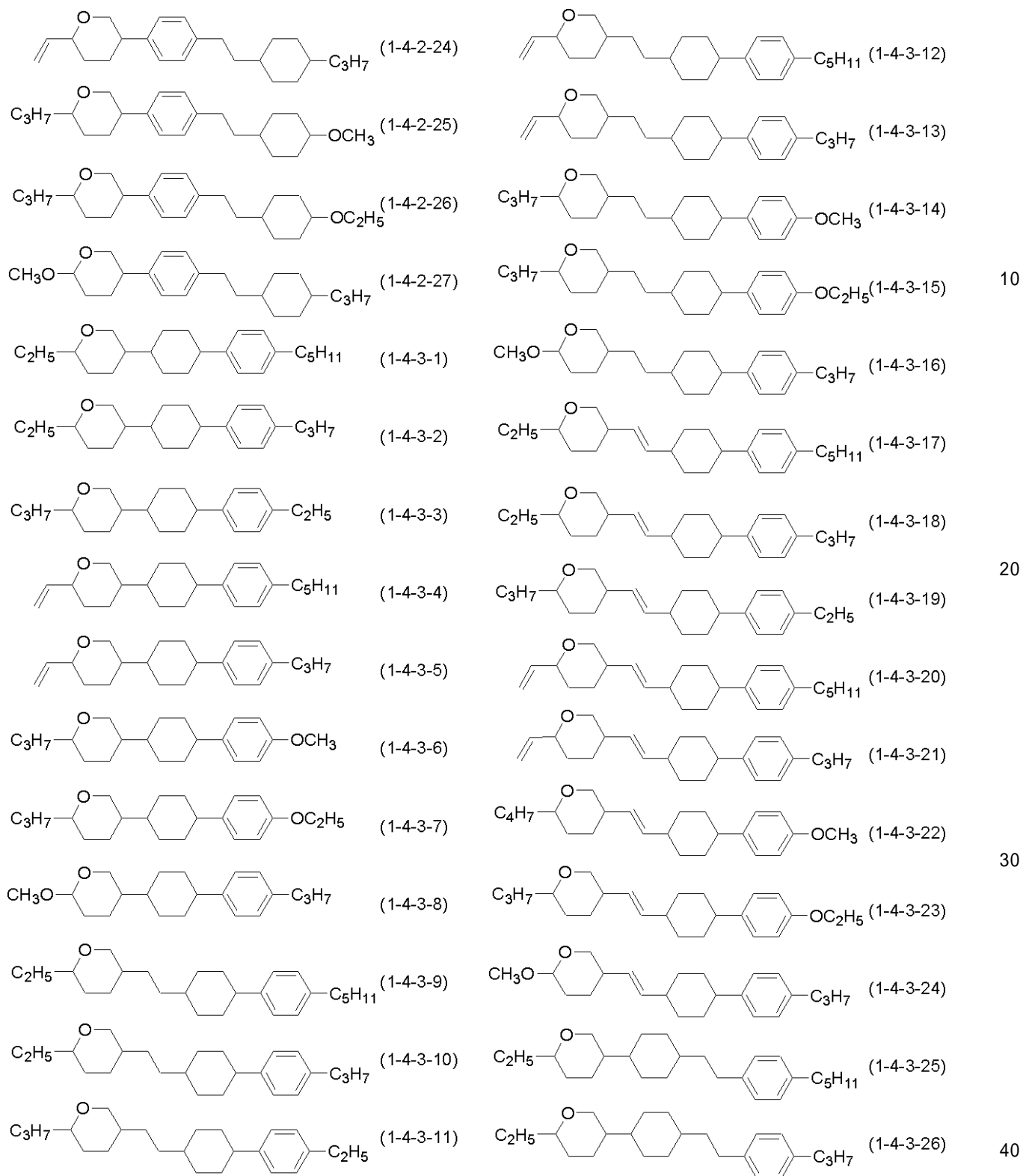
【 0 1 5 0 】



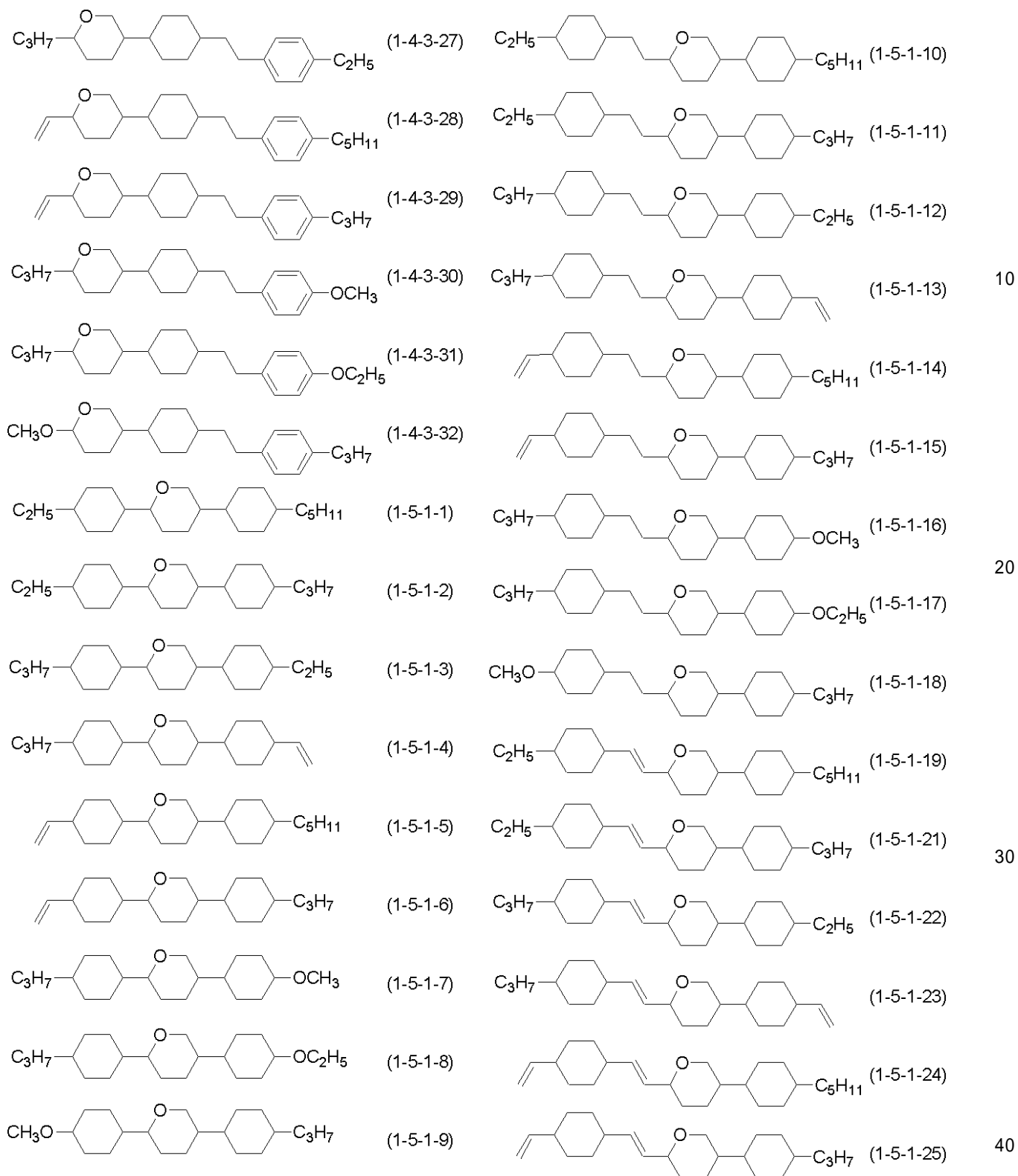
【 0 1 5 1 】



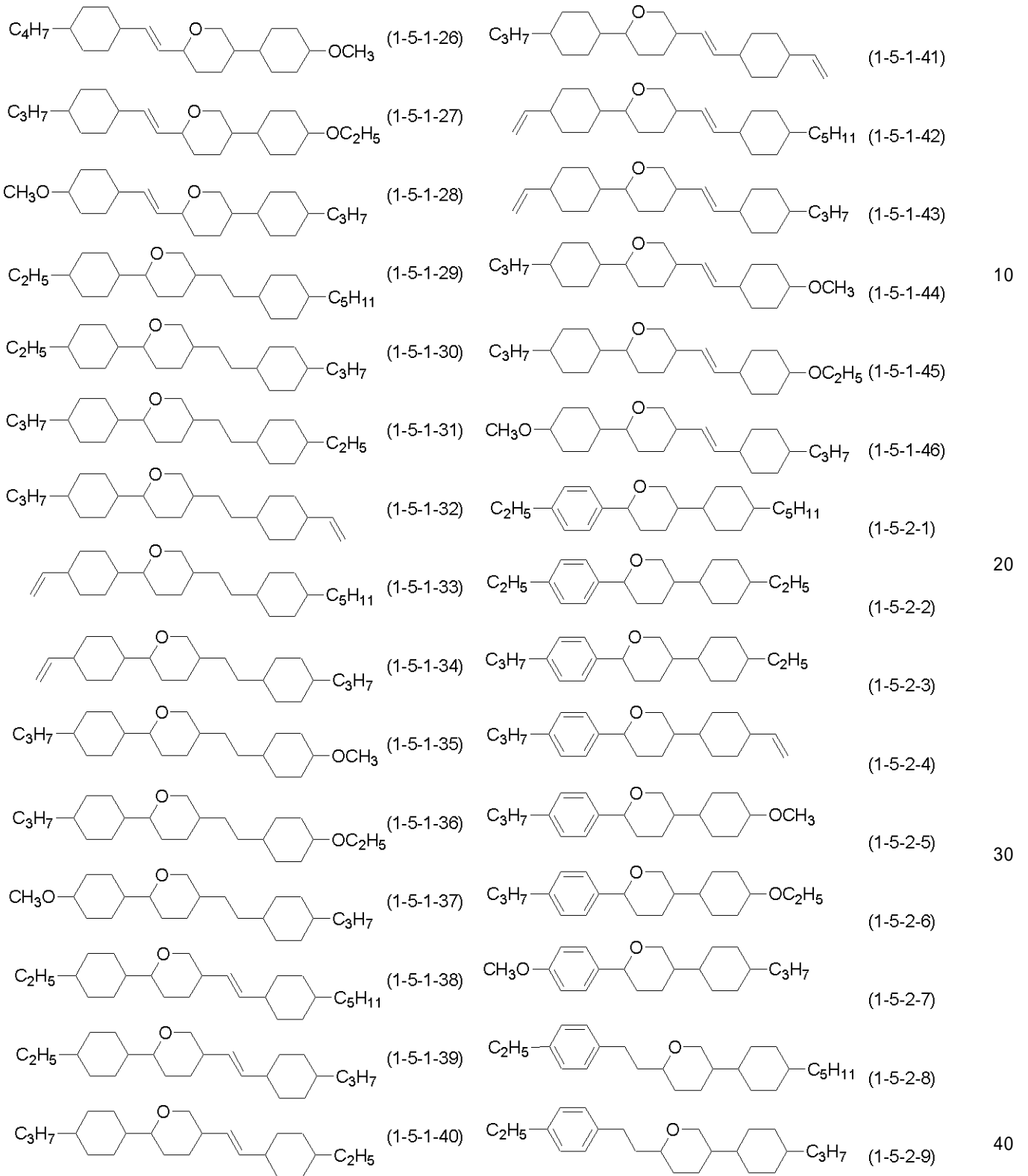
【 0 1 5 2 】



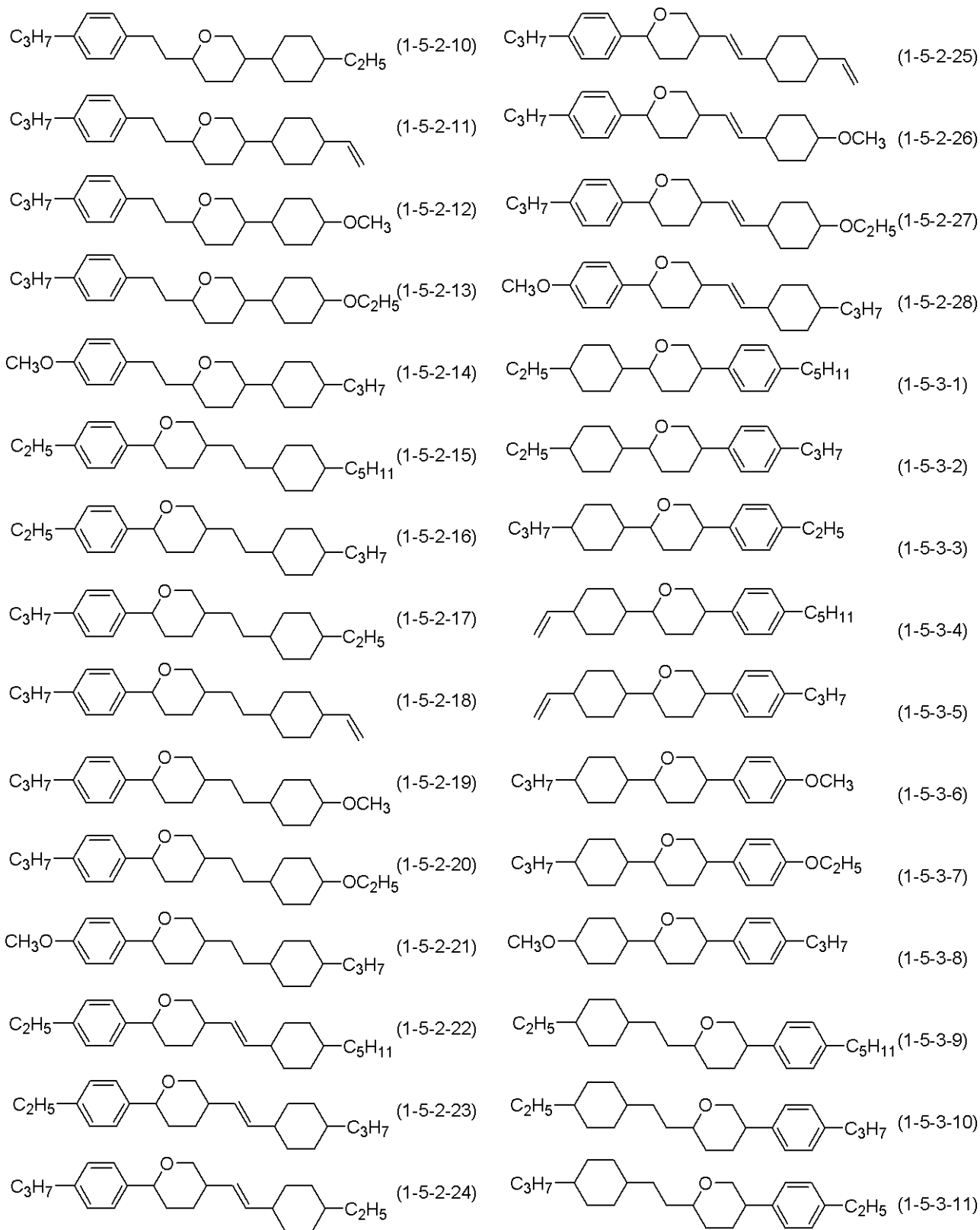
【 0 1 5 3 】



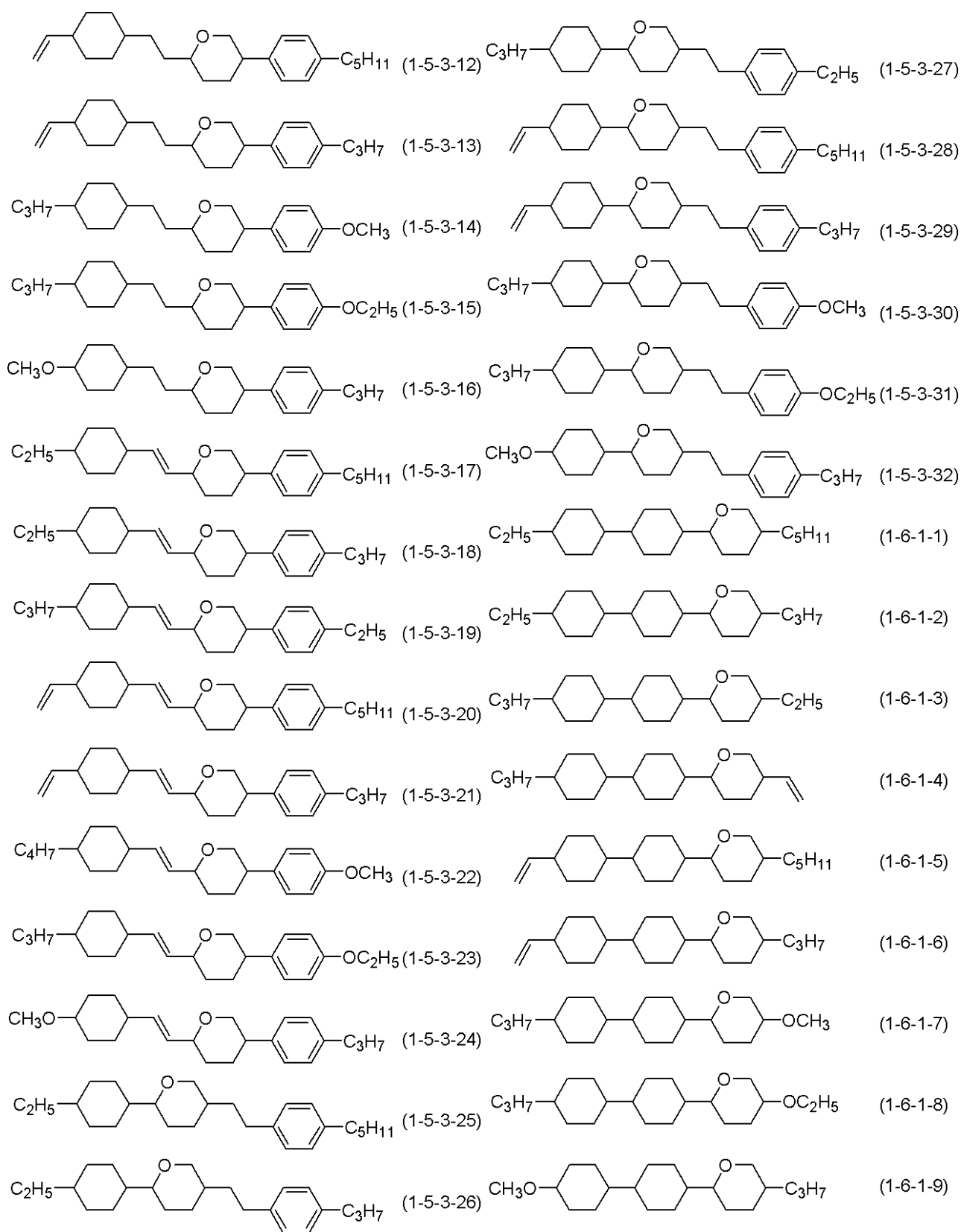
【 0 1 5 4 】



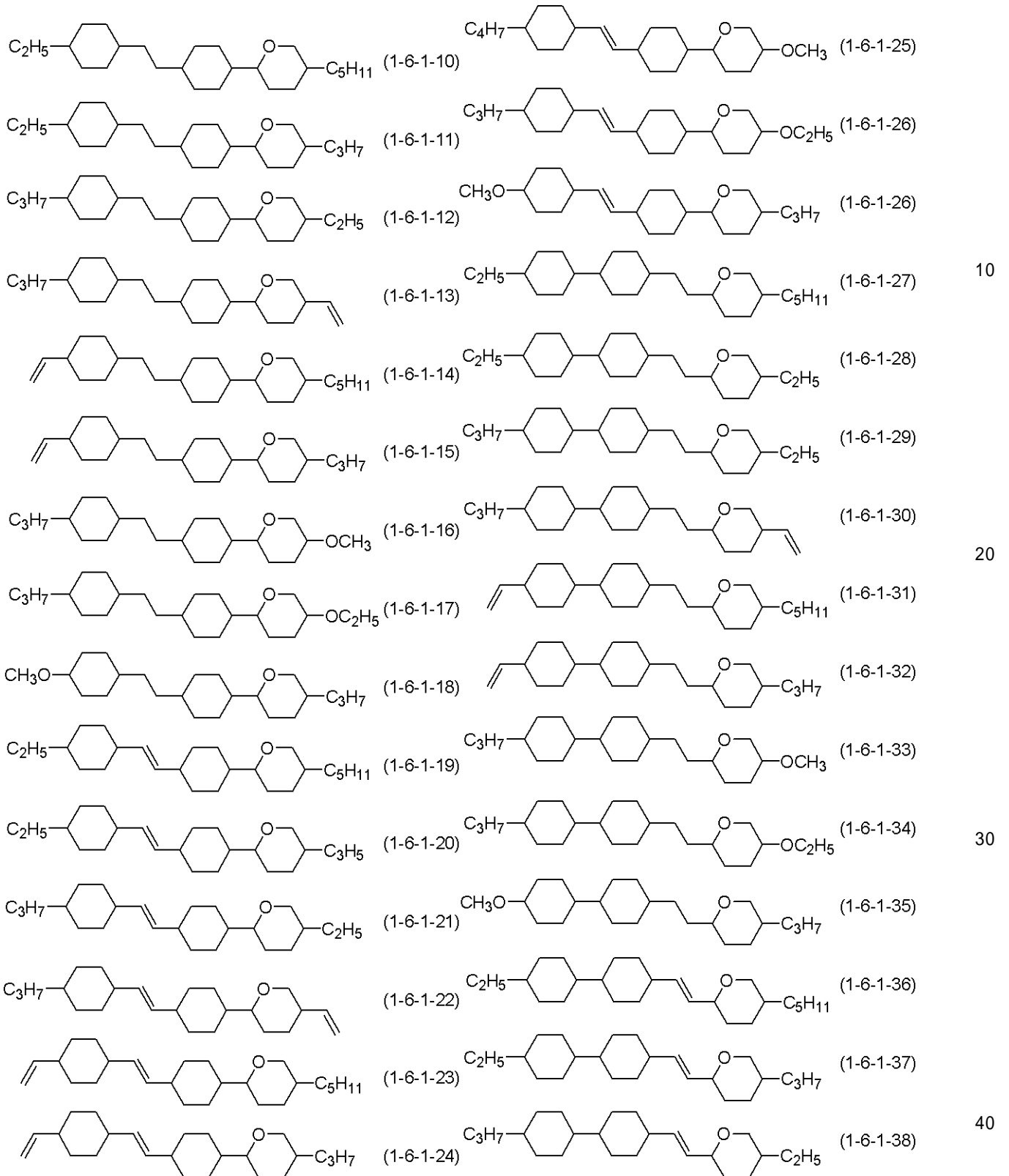
【 0 1 5 5 】



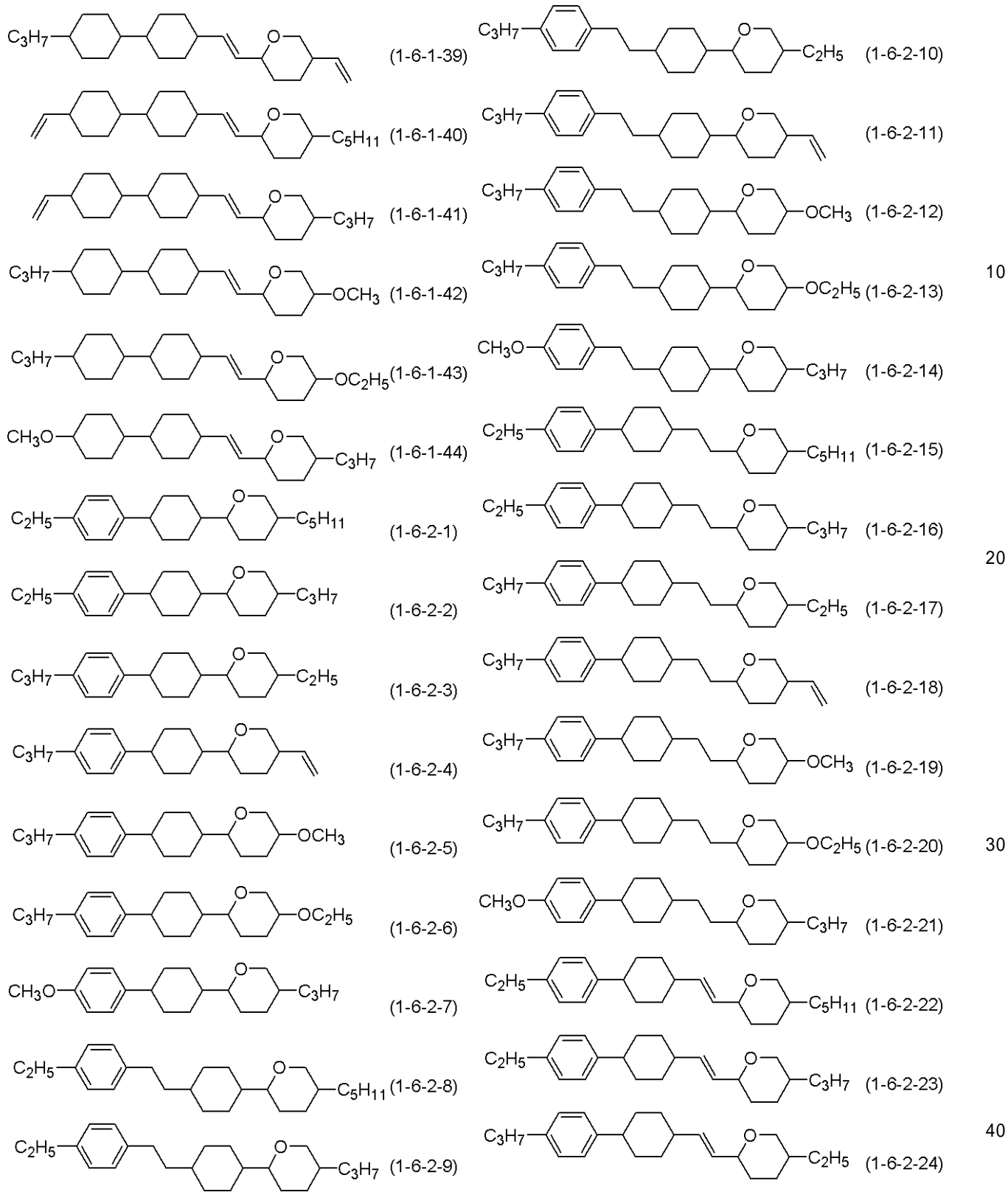
【 0 1 5 6 】



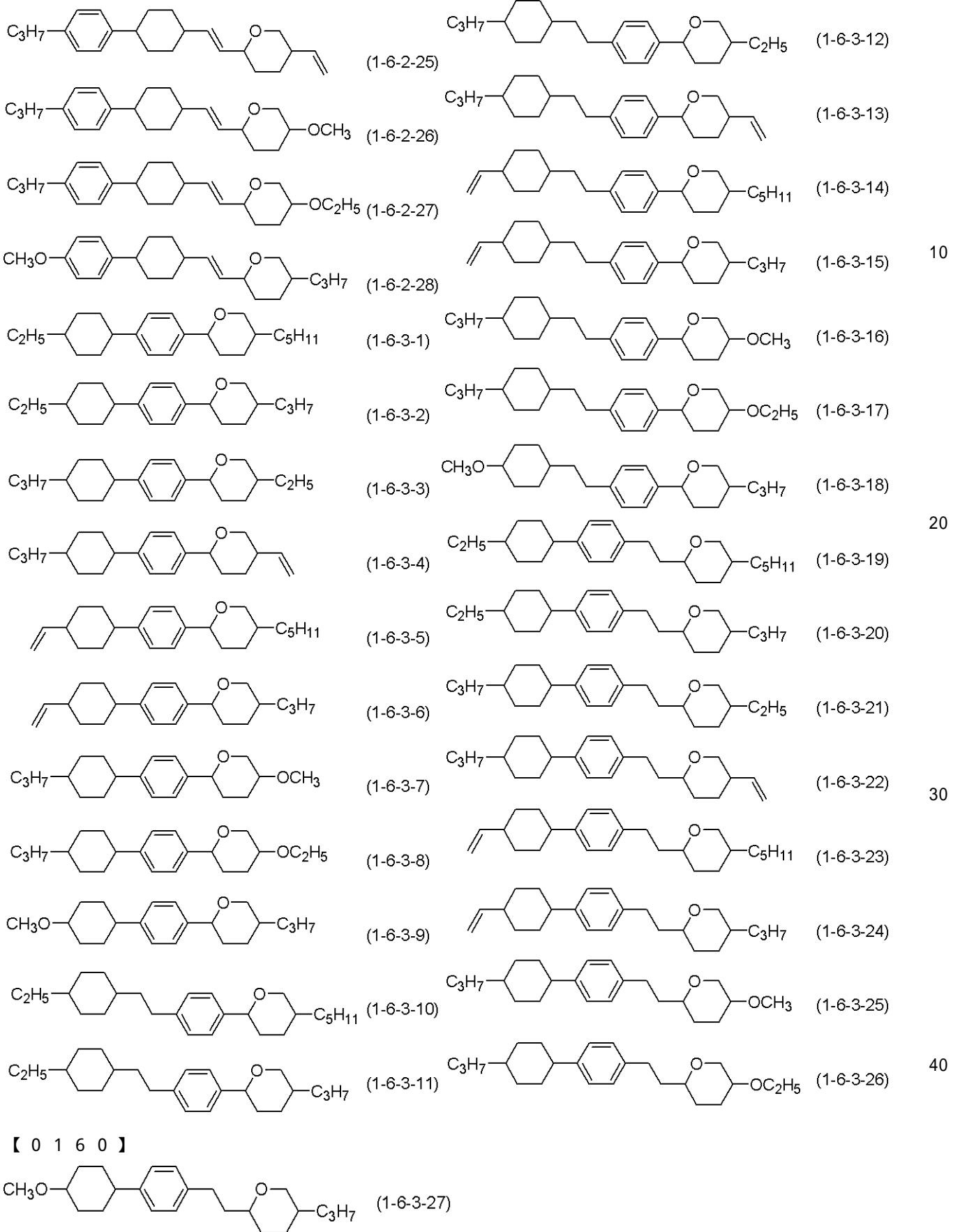
【 0 1 5 7 】



【 0 1 5 8 】



【 0 1 5 9 】



調製例

4つの化合物を混合して、ネマチック相を有する組成物A（母液晶）を調製した。4つの化合物は、4 - （4 - プロピルシクロヘキシル）ベンゾニトリル（24%）、4 - （4

-ペンチルシクロヘキシル)ベンゾニトリル(36%)、4-(4-ヘプチルシクロヘキシル)ベンゾニトリル(25%)、4-(4-(4-ペンチルシクロヘキシル)フェニル)ベンゾニトリル(15%)である。組成物Aの物性値は次のとおりであった。上限温度(NI)=71.7、粘度(η)=27.0 mPa·s、誘電率異方性(ϵ)=11.0、光学異方性(n)=0.137。

【0162】

実施例10

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例1で得られた2-エチル-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-1-1-1)の15%とからなる組成物Bを調製した。測定した組成物Bの物性値を外挿して化合物No.1-1-1-1の物性値を算出した。上限温度(NI)=31.0、誘電率異方性(ϵ)=-0.6、光学異方性(n)=0.024。

10

【0163】

実施例11

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例2で得られた2-ビニル-5-(4-ペンチルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-1-1-4)の15%とからなる組成物Cを調製した。測定した組成物Cの物性値を外挿して化合物No.1-1-1-4の物性値を算出した。上限温度(NI)=51.0、粘度(η ; mPa·s)=2.8、誘電率異方性(ϵ)=0.3、光学異方性(n)=0.050。

20

【0164】

実施例12

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例3で得られた2-ビニル-5-(4-プロピルシクロヘキシル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-1-1-5)の15%とからなる組成物Dを調製した。測定した組成物Dの物性値を外挿して化合物No.1-1-1-5の物性値を算出した。上限温度(NI)=37.7、誘電率異方性(ϵ)=-0.4、光学異方性(n)=0.044。

【0165】

実施例13

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例4で得られた2-エチル-5-(4'-プロピル-ピシクロヘキシル-4-イル)テトラヒドロピラン(化合物No.1-4-1-2)の15%とからなる組成物Eを調製した。測定した組成物Eの物性値を外挿して化合物No.1-4-1-2の物性値を算出した。上限温度(NI)=175.0、粘度(η ; mPa·s)=45.5、誘電率異方性(ϵ)=0.3、光学異方性(n)=0.077。

30

【0166】

実施例14

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例5で得られた5-(4'-プロピルピシクロヘキシル-4-イル)-2-ビニル-テトラヒドロピラン(化合物No.1-4-1-6)の15%とからなる組成物Fを調製した。測定した組成物Fの物性値を外挿して化合物No.1-4-1-6の物性値を算出した。上限温度(NI)=196.4、誘電率異方性(ϵ)=2.1、光学異方性(n)=0.097。

40

【0167】

実施例15

調製例に記載した組成物Aの85%と実施例6で得られた2-プロピル-5-(4'-ビニルピシクロヘキシル-4-イル)-テトラヒドロピラン(化合物No.1-4-1-4)の15%とからなる組成物Gを調製した。測定した組成物Gの物性値を外挿して化合物No.1-4-1-4の物性値を算出した。上限温度(NI)=182.4、誘電率異方性(ϵ)=1.4、光学異方性(n)=0.084。

【0168】

実施例16

50

調製例に記載した組成物 A の 85% と実施例 7 で得られた 2 - [2 - (4 - エチルシクロヘキシル) エチル] - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 5 - 1 - 10) の 15% とからなる組成物 H を調製した。測定した組成物 H の物性値を外挿して化合物 No . 1 - 5 - 1 - 10 の物性値を算出した。上限温度 (NI) = 141 . 0、粘度 (; m P a · s) 36 . 5、誘電率異方性 () = - 1 . 7、光学異方性 (n) = 0 . 044。

【 0169 】

実施例 17

調製例に記載した組成物 A の 85% と実施例 8 で得られた 2 - [2 - (4 - エチルシクロヘキシル) ビニル] - 5 - (4 - ペンチルシクロヘキシル) テトラヒドロピラン (化合物 No . 1 - 5 - 1 - 19) の 15% とからなる組成物 I を調製した。測定した組成物 I の物性値を外挿して化合物 No . 1 - 5 - 1 - 19 の物性値を算出した。上限温度 (NI) = 174 . 4、粘度 (; m P a · s) 34 . 3、誘電率異方性 () = 1 . 4、光学異方性 (n) = 0 . 070

10

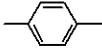
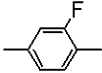
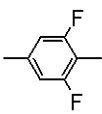
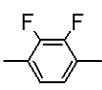

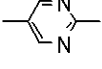
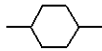
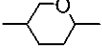
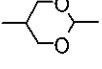
【 0170 】

本発明の代表的な組成物を組成物例 1 ~ 15 にまとめた。最初に、組成物の成分である化合物とその量 (重量%) を示した。化合物は下記の表 1 の取り決めに従い、左末端基、結合基、環構造、および右末端基の記号によって表示した。

【 0171 】

表1 記号を用いた化合物の表記方法

R-(A1)-Z1-...-Zn-(An)-X

1)左末端基 R-	記号	3)結合基 -Zn-	記号
$C_nH_{2n+1}-$	n-	$-C_2H_4-$	2
$C_nH_{2n+1}OC_mH_{2m}-$	nOm-	$-C_4H_8-$	4
$CH_2=CH-$	V-	$-CH=CH-$	V
$C_nH_{2n+1}CH=CH-$	nV-	$-COO-$	E
$CH_2=CHC_nH_{2n}-$	Vn-	$-C\equiv C-$	T
$C_nH_{2n+1}CH=CHC_mH_{2m}-$	nVm-	$-CF_2O-$	X
$CF_2=CH-$	VFF-		
$CF_2=CHC_nH_{2n}-$	VFFn-		
2)環構造 -An-	記号	4)右末端基 -X	記号
	B	-F	-F
	B(F)	-Cl	-CL
		-OCF ₂ H	-OCF ₂ H
		-OCF ₃	-OCF ₃
	B(F, F)	-CF ₃	-CF ₃
		-C _n H _{2n+1}	-n
		-OC _n H _{2n+1}	-On
	B(2F, 3F)	-CH=CH ₂	-V
		-C _n H _{2n} CH=CH ₂	-nV
		-C _n H _{2n} CH=CHC _m H _{2m+1}	-nVm
	Py	-CH=CF ₂	-VFF
		-COOCH ₃	-EMe
	H		
	dh		
	G		

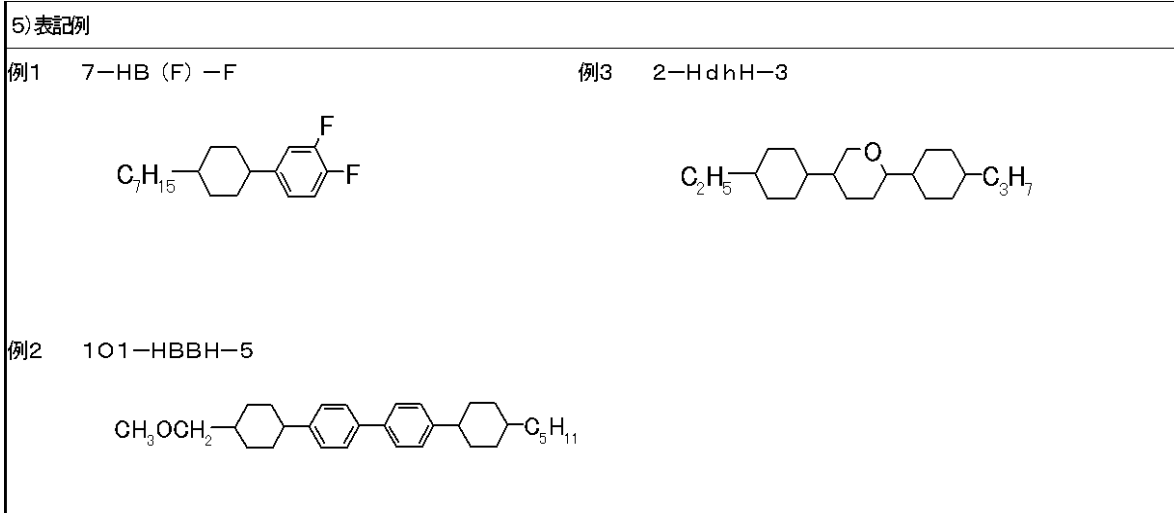
10

20

30

40

【 0 1 7 2 】



10

20

30

40

50

【 0 1 7 3 】

組成物例 1

5 - H d h 2 H - 2	(1 - 5 - 1 - 1 0)	1 0 %
2 - H d h H - 3	(1 - 5 - 1 - 3)	5 %
5 - H B - C L	(2 - 1)	1 6 %
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	1 2 %
3 - H H - 5	(1 2 - 1)	4 %
3 - H H B - F	(3 - 1)	4 %
3 - H H B - C L	(3 - 1)	3 %
4 - H H B - C L	(3 - 1)	4 %
3 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %
4 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %
5 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %
7 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %
5 - H B B (F) - F	(3 - 2 3)	5 %
1 O 1 - H B B H - 5	(1 4 - 1)	3 %
3 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	2 %
4 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	3 %
5 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	3 %
3 - H H 2 B B (F , F) - F	(4 - 1 5)	3 %
4 - H H 2 B B (F , F) - F	(4 - 1 5)	3 %
N I = 1 2 1 . 2 ; n = 0 . 0 8 7 ; (2 0) = 2 0 . 8 m P a · s ; = 2 . 7 ; V t h = 2 . 8 4 V .		

上記組成物 1 0 0 部に O p - 0 5 を 0 . 2 5 部添加したときのピッチは 6 0 . 0 μ m であった。

【 0 1 7 4 】

組成物例 2

5 - H d h - V	(1 - 1 - 1 - 4)	3 %
V - H d h - 5	(1 - 1 - 1 - 7)	3 %
V - H d h V H - 3	(1 - 5 - 1 - 2 3)	3 %
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	9 %
3 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	9 %
4 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	8 %
5 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	8 %
3 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	2 0 %

5 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	1 4 %	
3 - H 2 B B (F , F) - F	(3 - 2 7)	7 %	
5 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	
5 - H H E B B - F	(4)	2 %	
3 - H H 2 B B (F , F) - F	(4 - 1 5)	3 %	
1 O 1 - H B B H - 4	(1 4 - 1)	4 %	
1 O 1 - H B B H - 5	(1 4 - 1)	4 %	

【 0 1 7 5 】

組成物例 3

5 - H d h - 2	(1 - 1 - 1 - 1)	5 %	10
5 - H d h 2 B - 2	(1 - 5 - 2 - 8)	5 %	
5 - H B - F	(2 - 1)	1 2 %	
6 - H B - F	(2 - 1)	9 %	
7 - H B - F	(2 - 1)	7 %	
2 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	7 %	
3 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	7 %	
4 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	7 %	
5 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	5 %	
3 - H H 2 B - O C F 3	(3 - 4)	4 %	
5 - H H 2 B - O C F 3	(3 - 4)	4 %	20
3 - H H B (F , F) - O C F 2 H	(3 - 3)	4 %	
3 - H H B (F , F) - O C F 3	(3 - 3)	5 %	
3 - H H 2 B (F) - F	(3 - 5)	3 %	
3 - H B B (F) - F	(3 - 2 3)	5 %	
5 - H B B (F) - F	(3 - 2 3)	5 %	
5 - H B B H - 3	(1 4 - 1)	3 %	
3 - H B (F) B H - 3	(1 4 - 2)	3 %	

【 0 1 7 6 】

組成物例 4

5 - H d h - 1 V	(1 - 1 - 1 - 6)	5 %	30
3 - H d h B - 2	(1 - 5 - 2)	4 %	
5 - H B - C L	(2 - 1)	7 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	8 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	5 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	8 %	
3 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	2 0 %	
5 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	1 0 %	
3 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	1 0 %	
4 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	3 %	
5 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	3 %	40
2 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 6)	3 %	
3 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 6)	5 %	
5 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 6)	3 %	
3 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	6 %	

【 0 1 7 7 】

組成物例 5

V - H d h 2 H - 3	(1 - 5 - 1 - 1 3)	4 %	
5 - H d h 2 B - 2	(1 - 5 - 2 - 8)	6 %	
3 - H B - C L	(2 - 1)	3 %	
5 - H B - C L	(2 - 1)	2 %	50

3 - H H B - O C F 3	(3 - 1)	5 %	
3 - H 2 H B - O C F 3	(3 - 1 3)	5 %	
5 - H 4 H B - O C F 3	(3 - 1 9)	1 5 %	
V - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	
3 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	
5 - H H B (F) - F	(3 - 2)	5 %	
3 - H 4 H B (F , F) - C F 3	(3 - 2 1)	8 %	
5 - H 4 H B (F , F) - C F 3	(3 - 2 1)	1 0 %	
5 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	
5 - H 4 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	7 %	10
2 - H 2 B B (F) - F	(3 - 2 6)	5 %	
3 - H 2 B B (F) - F	(3 - 2 6)	5 %	
3 - H B E B (F , F) - F	(3 - 3 6)	5 %	
【 0 1 7 8 】			
組成物例 6			
5 - H d h - V	(1 - 1 - 1 - 4)	4 %	
5 - H d h 2 H - 2	(1 - 5 - 1 - 1 0)	5 %	
3 - H d h B - 2	(1 - 5 - 2)	5 %	
5 - H B - C L	(2 - 1)	1 3 %	
7 - H B (F , F) - F	(2 - 3)	3 %	20
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	1 0 %	
3 - H H - 5	(1 2 - 1)	5 %	
3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	5 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	8 %	
3 - H H B - O 1	(1 3 - 1)	5 %	
2 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	
3 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	
5 - H H B (F) - F	(3 - 2)	7 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	6 %	
3 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	30
4 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	5 %	
【 0 1 7 9 】			
組成物例 7			
2 - H d h H - 3	(1 - 5 - 1 - 3)	5 %	
V - H d h V H - 3	(1 - 5 - 1 - 2 3)	5 %	
5 - H B - C L	(2 - 1)	3 %	
7 - H B (F) - F	(2 - 2)	7 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	9 %	
3 - H H - E M e	(-)	1 3 %	
3 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	40
5 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	
3 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	1 0 %	
4 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	5 %	
4 - H G B (F , F) - F	(3 - 9 1)	5 %	
5 - H G B (F , F) - F	(3 - 9 1)	6 %	
2 - H 2 G B (F , F) - F	(3 - 9 4)	4 %	
3 - H 2 G B (F , F) - F	(3 - 9 4)	5 %	
5 - G H B (F , F) - F	(3 - 9 7)	7 %	
【 0 1 8 0 】			
組成物例 8			

5 - H d h - 1 V	(1 - 1 - 1 - 6)	5 %	
5 - H d h V H - 2	(1 - 5 - 1 - 1 9)	5 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	8 %	
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	6 %	
3 - H H B (F , F) - F	(3 - 3)	1 0 %	
3 - H 2 H B (F , F) - F	(3 - 1 5)	9 %	
3 - H B B (F , F) - F	(3 - 2 4)	1 5 %	
3 - B B (F , F) X B (F , F) - F	(3 - 8 5)	2 5 %	
1 O 1 - H B B H - 5	(1 4 - 1)	7 %	
2 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	10
3 - H H B B (F , F) - F	(4 - 6)	3 %	
3 - H H 2 B B (F , F) - F	(4 - 1 5)	4 %	
N I = 9 0 . 6 ; n = 0 . 1 0 8 ;	(2 0) = 2 6 . 3 m P a · s ;	= 9 .	
6 ; V t h = 1 . 5 2 V .			

【 0 1 8 1 】

組成物例 9

5 - H d h 2 H - 2	(1 - 5 - 1 - 1 0)	4 %	
2 - H d h H - 3	(1 - 5 - 1 - 3)	4 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	5 %	
3 - H H - 5	(1 2 - 1)	5 %	20
3 - H H - O 1	(1 2 - 1)	6 %	
3 - H H - O 3	(1 2 - 1)	6 %	
3 - H B - O 1	(1 2 - 5)	5 %	
3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	5 %	
3 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(7 - 1)	1 0 %	
5 - H B (2 F , 3 F) - O 2	(7 - 1)	1 0 %	
3 - H H E H - 3	(1 3 - 2 0)	4 %	
3 - H H E H - 5	(1 3 - 2 0)	3 %	
4 - H H E H - 3	(1 3 - 2 0)	3 %	
2 - H H B (2 F , 3 F) - 1	(8 - 1)	4 %	30
3 - H H B (2 F , 3 F) - 2	(8 - 1)	4 %	
3 - H H B (2 F , 3 F) - O 2	(8 - 1)	1 2 %	
5 - H H B (2 F , 3 F) - O 2	(8 - 1)	1 0 %	
N I = 8 5 . 6 ; n = 0 . 0 7 5 ;	(2 0) = 2 7 . 4 m P a · s ;	= - 3	
. 3 .			

【 0 1 8 2 】

組成物例 1 0

2 - H d h H - 3	(1 - 5 - 1 - 3)	5 %	
3 - d h 2 B H - 2	(1 - 6 - 3 - 2 0)	5 %	
5 - H B - C L	(2 - 1)	3 %	40
7 - H B (F) - F	(5 - 3)	7 %	
3 - H H - 4	(1 2 - 1)	9 %	
3 - H H - E M e	(-)	1 3 %	
3 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	
5 - H H E B - F	(3 - 1 0)	8 %	
3 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	1 0 %	
4 - H H E B (F , F) - F	(3 - 1 2)	5 %	
4 - H G B (F , F) - F	(3 - 9 1)	5 %	
5 - H G B (F , F) - F	(3 - 9 1)	6 %	
2 - H 2 G B (F , F) - F	(3 - 9 4)	4 %	50

3 - H 2 G B (F , F) - F (3 - 9 4) 5 %
 5 - G H B (F , F) - F (3 - 9 7) 7 %

【 0 1 8 3 】

組成物例 1 1

3 - d h d h - V (1 - 3) 5 %
 3 - H d h B - 2 (1 - 5 - 2) 4 %
 5 - H B - C L (2 - 1) 7 %
 3 - H H - 4 (1 2 - 1) 8 %
 3 - H H B - 1 (1 3 - 1) 5 %
 3 - H H B (F , F) - F (3 - 3) 8 %
 3 - H B B (F , F) - F (3 - 2 4) 2 0 %
 5 - H B B (F , F) - F (3 - 2 4) 1 0 %
 3 - H H E B (F , F) - F (3 - 1 2) 1 0 %
 4 - H H E B (F , F) - F (3 - 1 2) 3 %
 5 - H H E B (F , F) - F (3 - 1 2) 3 %
 2 - H B E B (F , F) - F (3 - 3 6) 3 %
 3 - H B E B (F , F) - F (3 - 3 6) 5 %
 5 - H B E B (F , F) - F (3 - 3 6) 3 %
 3 - H H B B (F , F) - F (4 - 6) 6 %

10

【 0 1 8 4 】

20

組成物例 1 2

5 - H d h - 1 V (1 - 1 - 1 - 6) 4 %
 5 - H d h 2 H - 2 (1 - 5 - 1 - 1 0) 4 %
 5 - H d h V H - 2 (1 - 5 - 1 - 1 9) 3 %
 2 - B E B (F) - C (5) 5 %
 3 - B E B (F) - C (5) 4 %
 4 - B E B (F) - C (5) 1 2 %
 1 V 2 - B E B (F , F) - C (5) 1 6 %
 3 - H B - O 2 (1 2 - 5) 3 %
 3 - H H - 4 (1 2 - 1) 3 %
 3 - H H B - F (3 - 1) 3 %
 3 - H H B - 1 (1 3 - 1) 4 %
 3 - H H B - O 1 (1 3 - 1) 4 %
 3 - H B E B - F (3 - 3 4) 4 %
 3 - H H E B - F (3 - 3 4) 7 %
 5 - H H E B - F (3 - 3 4) 7 %
 3 - H 2 B T B - 2 (1 3 - 1 5) 4 %
 3 - H 2 B T B - 3 (1 3 - 1 5) 4 %
 3 - H 2 B T B - 4 (1 3 - 1 5) 4 %
 3 - H B (F) T B - 2 (1 3 - 1 4) 5 %

30

40

N I = 9 2 . 7 ; n = 0 . 1 3 8 ; (2 0) = 4 1 . 7 m P a · s ; = 2 8
 . 0 ; V t h = 1 . 0 7 V .

【 0 1 8 5 】

組成物例 1 3

V - H d h - 5 (1 - 1 - 1 - 7) 1 0 %
 5 - H d h 2 B - 2 (1 - 5 - 2 - 8) 5 %
 3 - B E B (F) - C (5) 8 %
 3 - H B - C (5 - 2) 8 %
 V - H B - C (5 - 2) 8 %
 1 V - H B - C (5 - 2) 8 %

50

3 - H B - O 2	(1 2 - 5)	3 %
3 - H H - 2 V	(1 2 - 1)	9 %
3 - H H - 2 V 1	(1 2 - 1)	3 %
V 2 - H H B - 1	(1 3 - 1)	9 %
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	5 %
3 - H H E B - F	(3 - 1 0)	7 %
3 - H 2 B T B - 2	(1 3 - 1 5)	6 %
3 - H 2 B T B - 3	(1 3 - 1 5)	6 %
3 - H 2 B T B - 4	(1 3 - 1 5)	5 %

【 0 1 8 6 】

組成物例 1 4

V - H d h 2 H - 3	(1 - 5 - 1 - 1 3)	1 0 %
V - H d h V H - 3	(1 - 5 - 1 - 2 3)	8 %
5 - B E B (F) - C	(5)	5 %
V - H B - C	(5 - 2)	1 1 %
5 - P y B - C	(5 - 8)	6 %
4 - B B - 3	(1 2 - 8)	1 1 %
3 - H H - 2 V	(1 2 - 1)	1 0 %
5 - H H - V	(1 2 - 1)	1 1 %
V - H H B - 1	(1 3 - 3)	7 %
V 2 - H H B - 1	(1 3 - 3)	3 %
3 - H H B - 1	(1 3 - 3)	3 %
1 V 2 - H B B - 2	(1 3 - 4)	1 0 %
3 - H H E B H - 3	(1 4 - 6)	5 %

【 0 1 8 7 】

組成物例 1 5

5 - H d h - 2	(1 - 1 - 1 - 1)	5 %
V - H d h - 5	(1 - 1 - 1 - 7)	6 %
1 V 2 - B E B (F , F) - C	(5)	8 %
3 - H B - C	(5 - 2)	1 8 %
2 - B T B - 1	(1 2 - 1 0)	1 0 %
5 - H H - V F F	(1 2 - 1)	2 0 %
3 - H H B - 1	(1 3 - 1)	6 %
V F F - H H B - 1	(1 3 - 1)	6 %
V F F 2 - H H B - 1	(1 3 - 1)	6 %
3 - H 2 B T B - 2	(1 3 - 1 5)	5 %
3 - H 2 B T B - 3	(1 3 - 1 5)	5 %
3 - H 2 B T B - 4	(1 3 - 1 5)	5 %

【 産業上の利用可能性 】

【 0 1 8 8 】

が小さく透明点の高い液晶性化合物、または が小さく相溶性に優れる液晶性化合物となる液晶性化合物であり、優れた液晶組成物となる、さらにいろんなモードの液晶表示素子となる。

10

20

30

40

フロントページの続き

(51)Int.Cl.	F I	テーマコード(参考)
C 0 9 K 19/12 (2006.01)	C 0 9 K 19/12	
C 0 9 K 19/18 (2006.01)	C 0 9 K 19/18	

Fターム(参考) 4H027 BA01 BC04 BD01 BD03 BD05 BD07 BD08 BD09 BD20 BD24
CC07 CD01 CD04 CD07 CE01 CE04 CG01 CG04 CK01 CK04
CL01 CL04 CM01 CM04 CN01 CN04 CP01 CP04 CQ01 CQ04
CQ10 CR01 CR04 CS01 CS04 CT01 CT04 CT07 CU01 CU04
CW01 DE01 DE04 DF01 DF04 DH04 DK04